

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

ТОМ 15, №2
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.2,
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

- Сотова Ю. И., Гороховатский Ю. А., Темнов Д. Э. Роль электретного эффекта в формировании пьезоэлектрического состояния в пленках сополимера поливинилиденфторида с тетрафторэтиленом 8

Физическая электроника

- Филимонов А. В., Бондаренко В. Б., Кумар Рави. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов при высоких температурах 17

- Бердников А. С., Краснова Н. К., Масюкевич С. В., Соловьев К. В. Визуализация трехмерной зоны устойчивости квадрупольного фильтра масс в постоянном продольном магнитном поле 26

Физическое материаловедение

- Терёшина И. С., Политова Г. А., Каминская Т. П., Попов В. В., Гундеров Д. В., Филимонов А. В., Пелевин И. А. Особенности формирования наноструктуры в сплавах системы Nd-Pr-Fe-B, исследованные методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии 34

Биофизика и медицинская физика

- Антонова Д. А., Зотова А. Д., Усатых А. А., Морозова Н. Е., Якунина М. В. Характеризация флуоресцентных белков для изучения морфологических перестроек внутри одиночных бактериальных клеток при инфекции бактериофагом *phiKZ* с помощью оптической микроскопии 46

Ядерная физика

- Тиба А., Карасев П. А., Бердников Я. А., Егоров А. Ю., Миронова С. Ю. Особенности получения изотопа меди-64 на циклотроне МГЦ-20 Санкт-Петербургского политехнического университета 56

- Экинджи Ф., Бостанджи Э., Гузель М. С., Дагли О. Анализ влияния толщины тканей человеческого черепа на диапазон пиков Брэгга при протонной терапии с помощью программ TRIM и GEANT4 (статья на английском языке) 64

Теоретическая физика

- Маханта Ч. Р., Дас М. П. Реконструкция модели скалярного поля квинтэссенции для новой голографической модели темной энергии во Вселенной Бианки типа I (статья на английском языке) 79

Математика

- Юрова Н. В. О классах сопряженности в группе F_4 над ролею q с характеристикой 2 93

Механика

- Савиковский А. В., Семенов А. С. Вычисление коэффициентов интенсивности напряжений в ортотропных материалах при смешанной моде разрушения в плоском напряженном состоянии 102

Смирнов А. С., Суворов С. В. *Двухфакторная оптимизация в задаче о брахистохроне* 124

Лавров Ю. А. *Действие периодически движущейся точечной нагрузки на круглую пластину и находящийся под ней цилиндрический водозаполненный объем* 140

Contents

Condensed matter physics

- Sotova Yu. I., Gorokhovatsky Yu. A., Temnov D. E.** *The role of the electret effect in the formation of the piezoelectric state in the polyvinylidene fluoride-tetrafluoroethylene copolymer films* 8

Physical electronics

- Filimonov A. V., Bondarenko V. B., Kumar Ravi.** *A chaotic potential of charged dislocations in the III-nitride heterojunctions at high temperatures* 17

- Berdnikov A. S., Krasnova N. K., Masyukevich S. V., Solovyev K. V.** *Visualization of the 3D stability zone of a quadrupole mass filter in the static longitudinal magnetic field* 26

Physical materials technology

- Tereshina I. S., Politova G. A., Kaminskaya T. P., Popov V. V., Gunderov D. V., Filimonov A. V., Pelevin I. A.** *Features of the nanostructure formation in the Nd-Pr-Fe-B-system alloys: a study by AFM and MFM* 34

Biophysics and medical physics

- Antonova D. A., Zotova A. D., Usatykh A. A., Morozova N. E., Yakunina M. V.** *Characterization of fluorescent proteins for studying the morphological rearrangements inside single bacterial cells during infection with phiKZ bacteriophage* 46

Nuclear physics

- Tiba A., Karaseov P. A., Berdnikov Ya. A., Egorov A. Yu., Mironova S. Yu.** *Features of the copper-64 isotope production using the MGC-20 cyclotron at St. Petersburg Polytechnical University* 56

- Ekinci F., Bostanci E, Güzel M. S., Dağlı Ö.** *Analysing the effect of a cranium thickness on a Bragg peak range in the proton therapy: a TRIM and GEANT4 based study* 64

Theoretical physics

- Mahanta C. R., Das M. P.** *Reconstructing quintessence scalar field model from new holographic dark energy in Bianchi type I universe* 79

Mathematics

- Yurova N. V.** *On conjugacy classes of the F_4 group over a field q with characteristic 2* 93

Mechanics

- Savikovskii A. V., Semenov A. S.** *Calculation of mixed-mode stress intensity factors for orthotropic materials in the plane stress state* 102

- Smirnov A. S., Suvorov S. V.** *Two-factor optimization in the brachistochrone problem* 124

- Lavrov Yu. A.** *The response of a round plate and a cylindrical water-filled volume underneath to a point load moving periodically* 140

Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 538.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15201>

РОЛЬ ЭЛЕКТРЕТНОГО ЭФФЕКТА В ФОРМИРОВАНИИ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ В ПЛЕНКАХ СОПОЛИМЕРА ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА С ТЕТРАФТОРЭТИЛЕНОМ

Ю. И. Сотова [✉], **Ю. А. Гороховатский**, **Д. Э. Темнов**

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,

Санкт-Петербург, Россия

[✉] juliasotova1992@mail.ru

Аннотация. С целью выяснения механизма формирования пьезоэлектрического состояния, в работе изучено явление поляризации полимерных пленок сополимера поливинилиденфторида с тетрафторэтиленом (П(ВДФ-ТФЭ)) в поле коронного разряда при повышенной температуре. Для анализа процессов накопления и релаксации зарядов, происходящих в П(ВДФ-ТФЭ) при поляризации, применялась спектроскопия токов термостимулированной деполяризации. Полученные результаты позволили обнаружить взаимосвязь процессов формирования электретного и пьезоэлектрического состояний в П(ВДФ-ТФЭ), а также объяснить указанный механизм. На этой основе была разработана и опробована методика поляризации в поле коронного разряда, позволяющая снизить вероятность электрического пробоя, приводящего к механическим повреждениям пленок, а также улучшить ключевые характеристики исследованных объектов.

Ключевые слова: электретное состояние, поливинилиденфторид, тетрафторэтилен, пьезоэлектрический эффект, спектроскопия токов термостимулированной деполяризации

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания Министерства просвещения Российской Федерации (проект № FSZN-2020-0026).

Для цитирования: Сотова Ю. И., Гороховатский Ю. А., Темнов Д. Э. Роль электретного эффекта в формировании пьезоэлектрического состояния в пленках сополимера поливинилиденфторида с тетрафторэтиленом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 8–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15201>

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.15201>

THE ROLE OF THE ELECTRET EFFECT IN THE FORMATION OF THE PIEZOELECTRIC STATE IN THE POLYVINYLIDENE FLUORIDE-TETRAFLUOROETHYLENE COPOLYMER FILMS

Yu. I. Sotova ✉, **Yu. A. Gorokhovatsky**, **D. E. Temnov**

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

✉ juliasotova1992@mail.ru

Abstract. In this work, the phenomenon of polarization of polyvinylidene fluoride-tetrafluoroethylene copolymer (P(VDF-TFE)) polymer films in the field of a corona discharge at elevated temperatures has been studied in order to elucidate the mechanism of formation of the piezoelectric state. The TSD spectroscopy was used to analyze the charge accumulation and relaxation processes occurring in the (P(VDF-TFE)) films during polarization. The results obtained made it possible to reveal an interrelationship of forming the electret and piezoelectric states in the (P(VDF-TFE)) as well as to explain the mentioned mechanism. On this basis a polarization procedure in the field of the corona discharge was developed and tested. This procedure permitted reducing the probability of electrical breakdown leading to mechanical damage of the films and allowed improving key characteristics of the objects under question.

Keywords: electret state, polyvinylidene fluoride, tetrafluoroethylene, piezoelectric effect, TSD spectroscopy

Funding: The research was supported by the Ministry of Education of Russian Federation as a part of a state task (project No. FSZN-2020-0026).

For citation: Sotova Yu. I., Gorokhovatsky Yu. A., Temnov D. E., The role of the electret effect in the formation of the piezoelectric state in the polyvinylidene fluoride-tetrafluoroethylene copolymer films, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 8–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15201>

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

Введение

Впервые пьезоэлектрические свойства в поливинилиденфториде (ПВДФ) были обнаружены японским физиком Х. Каваи в 1969 году [1]. Однако имеются определенные трудности изготовления пьезопленки из гомополимера ПВДФ, связанные с высоким коэрцитивным полем (порядка 10^8 В/м, что на два порядка выше, чем у пьезокерамики) [2], поэтому обычно в качестве пьезоэлементов используются пьезоэлектрические полимеры с более низкой величиной коэрцитивного поля – соединения на основе сополимеров винилиденфторида с трифторэтиленом П(ВДФ-ТрФЭ) и винилиденфторида с тетрафторэтиленом П(ВДФ-ТФЭ). Стоит отметить, что пьезоэлектрические свойства и в гомополимере ПВДФ, и в сополимерах на его основе проявляются лишь после неоднократной предварительной вытяжки, что приводит к удлинению в несколько раз, по сравнению с первоначальной длиной [3, 4].

ПВДФ проявляет полиморфизм и существует в пяти различных кристаллических модификациях, которые обозначаются как α -, β -, γ -, δ - и ϵ -фазы [5]. Наибольший интерес исследователей привлекает β -фаза, поскольку она обладает пьезоэлектрическими свойствами [6].

Существует несколько способов создания пьезоэлектрического состояния в полимерных пленках на основе ПВДФ. Один из традиционных – это поляризация пленки в поле коронного разряда при повышенной температуре. Популярность способа связана с тем, что при коронной поляризации достигаются большие значения полей (по сравнению с таковыми при контактной поляризации) [7]. Однако в ходе поляризации в поле коронного разряда при повышенной температуре происходит электрическое старение полимерных пленок: с увеличением температуры поляризации возрастает вероятность электрического пробоя, а это приводит к механическим повреждениям полимерных пленок.

Цель настоящего исследования состояла в поиске взаимосвязи процессов формирования электретного и пьезоэлектрического состояний в пленках П(ВДФ-ТФЭ), а также в модификации технологии создания пьезоэлектрического состояния в полимерных пленках на основе ПВДФ, которая бы позволяла снизить вероятность электрического пробоя выбранного объекта при сохранении либо возможном улучшении его ключевых свойств.

Образцы и методы исследования

Объектом исследования служила пленка сополимера П(ВДФ-ТФЭ) торговой марки Ф2МЭ толщиной 20 мкм, предварительно вытянутая механически. В образцах создавалось пьезоэлектрическое состояние под действием поля коронного разряда, но при разных условиях поляризации.

Для исследования процессов накопления и релаксации зарядов, происходящих в П(ВДФ-ТФЭ) при поляризации, применялся метод термостимулированных токов деполяризации (ТСД). Измерения ТСД проводились на установке TSC II фирмы «Сетарам» (г. Лион, Франция).

Измерение пьезомодуля d_{33} осуществлялось динамическим методом с помощью прибора D33meter (г. Янчжоу, Китай).

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Традиционная процедура создания пьезоэлектрического состояния в сополимере П(ВДФ-ТФЭ) с помощью поля коронного разряда заключается в следующем: образец помещают в указанное поле при повышенной температуре, выдерживают в нем 10 мин (поддерживая постоянную температуру), а затем охлаждают до комнатной температуры в этом же поле. Ранее экспериментально было установлено, что для достижения лучших электретных характеристик поляризацию необходимо проводить в поле отрицательного коронного разряда [8].

Известно, что величина напряженности электрического поля, необходимого для получения пьезомодуля d_{33} высокого уровня, составляет 1,2 МВ/см [9]. Температуру поляризации мы варьировали от 50 до 80°C.

На рис. 1 представлены кривые ТСД в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных в поле отрицательного коронного разряда, при различной температуре поляризации. Из полученных данных видно, что при невысокой температуре поляризации (50 – 60°C) на кривых ТСД наблюдается один пик при температуре около 50 °С, а с увеличением температуры поляризации (70 и 80°C) на кривых появляются два сильно перекрывающихся пика (в районе 40 – 70°C). Изменение можно объяснить тем, что при поляризации пленок в поле отрицательного коронного разряда происходит захват гомозаряда глубокими приповерхностными ловушками. Сам гомозаряд в образце П(ВДФ-ТФЭ) не дает вклада в пьезоэффект, однако в образовавшемся внутреннем электрическом поле гомозаряда происходит ориентация полярных структур (они имеются в составе пьезоэлектрической β -фазы ПВДФ). По всей видимости, имеется два сорта полярных структур с различными энергиями активации. При поляризации в поле коронного разряда при темпера-

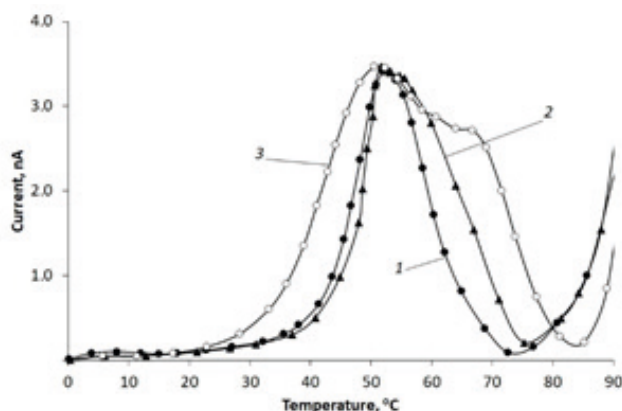


Рис. 1. Термостимулированные токи деполяризации в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных в поле отрицательного коронного разряда при различной температуре поляризации, °С: 50 (1), 70 (2) и 80 (3)



туре 50 – 70°C во внутреннем электрическом поле гомозаряда ориентируются полярные структуры только одного сорта (с меньшей энергией активации, их пик тока расположен при температуре около 50°C), а увеличение температуры поляризации до 80°C приводит к ориентации обоих сортов полярных структур, что проявляется в появлении двух сильно перекрывающихся пиков на кривых ТСД (в температурном интервале 40 – 70°C).

В таком случае возникает возможность оценить величины энергии активации и частотного фактора для полярных структур в образцах П(ВДФ-ТФЭ), для которых характерна меньшая энергия активации (табл. 1); образцы подвергались поляризации при различных температурах. Вычисления были выполнены методом начального подъема пикового значения тока и методом варьирования скорости нагрева образцов [10].

Проведена также оценка величины энергии активации гомозаряда в случае отрицательной полярности коронирующего электрода (на рис. 1 высвобождение гомозаряда из приповерхностных ловушек проявляется нарастанием тока выше 80°C) методом начального подъема. Полученное значение составило $(1,90 \pm 0,09)$ эВ. Аналогичный расчет для случая положительной полярности коронирующего электрода дал значение энергии активации гомозаряда, равное $(1,20 \pm 0,06)$ эВ.

Анализ зависимости пьезомодуля d_{33} от температуры поляризации (рис. 2), приводит к заключению, что сразу после поляризации (кривая 1) значения пьезомодуля высокие (в интервале 24 – 26 пКл/Н) и лишь незначительно зависят от температуры поляризации. Однако важной характеристикой пьезоэлектрических свойств выступает не только сама величина пьезомодуля, но и ее температурная стабильность.

Для проверки температурной стабильности полученных значений пьезомодуля d_{33} , пленки П(ВДФ-ТФЭ) выдерживали в термостате при температуре 70°C в течение двух с половиной часов. В результате было обнаружено, что пьезомодуль в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных при невысокой температуре (50 – 70°C), значительно уменьшился после выдержки в термостате (см. кривую 2 на рис. 2).

Таким образом, эта величина, полученная при температуре поляризации ниже 70°C, оказывается нестабильной. Поляризация же при температуре 80 – 90°C приводит к образованию стабильного значения пьезомодуля.

Таблица 1

Результаты определения ключевых характеристик полярных структур в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных при различных температурах

Метод определения W	Энергия активации W , эВ, при температуре поляризации		
	50°C	70°C	80°C
Метод начального подъема пикового значения тока	$0,82 \pm 0,04$	$0,82 \pm 0,04$	$0,83 \pm 0,04$
Метод варьирования скорости нагрева	$0,84 \pm 0,03$	$0,83 \pm 0,03$	$0,83 \pm 0,03$
Частотный фактор, найденный методом варьирования скорости нагрева, составлял для трех значений температуры поляризации $\omega = 10^{10} \text{ с}^{-1}$			

Примечания. 1. Приведены результаты для полярных структур, характеризующихся меньшей энергией активации (см. рис. 1 и пояснения в тексте). 2. Значения ω определены с точностью до половины декады.

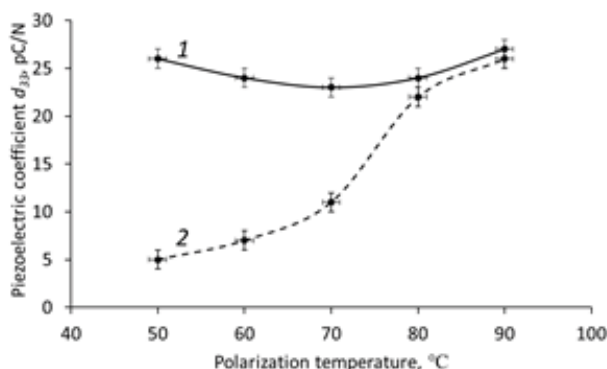


Рис. 2. Зависимости пьезомодуля d_{33} в пленках П(ВДФ-ТФЭ) от температуры поляризации, полученные сразу после поляризации (1) и через 2,5 ч последующего отжига при температуре 70°C (2)

Как уже было отмечено выше, выдерживание пленки в поле коронного разряда при повышенной температуре часто приводит к электрическим пробоям, и, как следствие, к ее механическому повреждению. С целью снижения вероятности электрического пробоя был использован метод поляризации во внутреннем поле гомозаряда: пленки П(ВДФ-ТФЭ) сначала подвергали поляризации при комнатной температуре в поле отрицательного коронного разряда в течение 10 мин (напряженность электрического поля составляла 1,2 МВ/см), затем прогревали (образец находился в разомкнутом состоянии, т. е. при отсутствии внешнего электрического поля) до различной температуры, после чего охлаждали до комнатной температуры. На рис. 3 приведены кривые токов ТСД в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных данным способом.

На графиках ТСД (рис. 3) видно, что с увеличением температуры прогрева растет значение максимума кривой и увеличивается площадь под ней. Следует отметить сходный вид кривых ТСД (по форме и положению пиков на температурной шкале) с низкотемпературными аналогами на рис. 1, что говорит о захвате гомозаряда глубокими приповерхностными ловушками и в данном случае, а также об ориентации полярных структур в образовавшемся внутреннем электрическом поле. Таким образом, с увеличением температуры прогрева растет подвижность полярных структур, их большее количество успевает сориентироваться, поэтому растут как значение максимума, так и площадь под кривой.

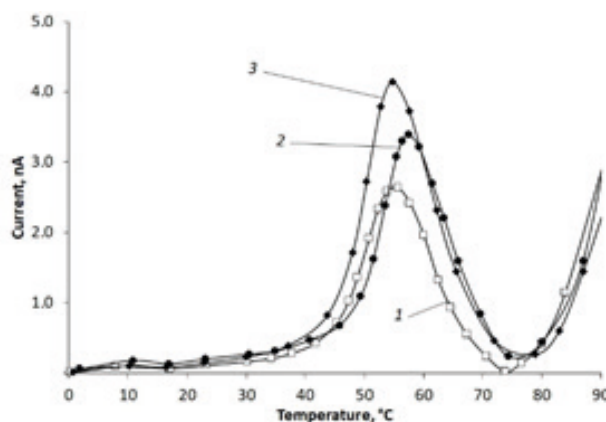


Рис. 3. Термостимулированные токи деполяризации в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных в поле отрицательного коронного разряда при комнатной температуре, а затем подвергнутых прогреву (в отсутствие электрического поля) до различной температуры, °С: 50 (1), 70 (2) и 80 (3)



В табл. 2 приведены результаты вычисления энергии активации и частотного фактора (с точностью до половины декады) полярных структур в пленках П(ВДФ-ТФЭ), поляризованных при комнатной температуре, а затем подвергнутых прогреву до разных температур и дальнейшему охлаждению до комнатной температуры (в разомкнутом состоянии, т. е. в отсутствие электрического поля), вычисленные методами начального подъема и варьирования скорости нагрева.

Таблица 2

Результаты определения ключевых характеристик полярных структур в пленках П(ВДФ-ТФЭ), прогретых до различной температуры после поляризации

Метод определения W	Энергия активации W , эВ, при температуре прогрева	
	70°C	90°C
Метод начального подъема пикового значения тока	$0,81 \pm 0,04$	$0,83 \pm 0,04$
Метод варьирования скорости нагрева	$0,83 \pm 0,03$	$0,84 \pm 0,03$
Частотный фактор, найденный методом варьирования скорости нагрева, составлял для двух значений температуры прогрева $\omega = 10^{10} \text{ с}^{-1}$		

Примечания. 1. Образцы пленок прогревали после поляризации в поле отрицательного коронного разряда при комнатной температуре. 2. Значения ω определены с точностью до половины декады.

Была проведена оценка значения энергии активации гомозаряда; высвобождение гомозаряда из приповерхностных ловушек в данном случае выражается в нарастании тока деполяризации после достижения 80°C (см. рис. 3). Значение, полученное методом начального подъема, составило $(1,90 \pm 0,09)$ эВ, как и в случае традиционного способа поляризации.

На рис. 4 приведены зависимости пьезомодуля d_{33} от температуры прогрева, проведенного сразу после поляризации (кривая 1) и спустя два с половиной часа выдержки в термостате при 70°C (кривая 2). Видно, что в первом случае пьезомодуль, измеренный сразу после ступенчатой процедуры (включает поляризацию при комнатной температуре, прогрев до заданной температуры, затем охлаждение до комнатной температуры) растет с увеличением температуры прогрева и достигает максимума (25 мКл/Н) при температуре прогрева 90°C. Однако во втором случае, когда процедура включает выдержку в термостате после прогрева до заданной температуры, пьезомодуль в образцах П(ВДФ-ТФЭ), прогретых до температуры 50 – 70°C, значительно снизился, а вот пьезомодуль образцов, прогретых до 80 – 90°C, практически не изменился. Оптимальной температурой прогрева оказалось значение 90°C. Именно оно дало максимальное значение пьезомодуля d_{33} (25 пКл/Н). Нагрев до более высокой температуры приводил уже к механической деформации образцов.

Таким образом, можно утверждать, что предложенный метод создания пьезоэлектрического состояния позволяет достигнуть в пленках П(ВДФ-ТФЭ) значения пьезомодуля, которое соизмеримо с получаемым традиционным способом; при этом вероятность электрического пробоя (и механического повреждения образца) значительно снижается.

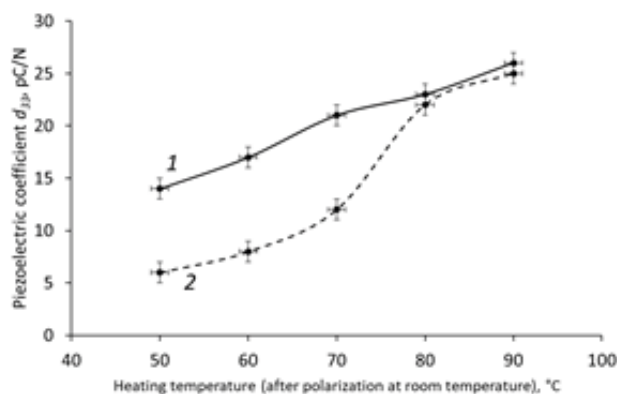


Рис. 4. Зависимости пьезомодуля d_{33} в поляризованных пленках П(ВДФ-ТФЭ) от температуры дальнейшего прогрева, полученные без последующего отжига (1) и через 2,5 ч последующего отжига при температуре 70°C (2).

Поляризация пленок проведена при комнатной температуре

Заключение

В результате проведенных исследований с помощью метода термоактивационной спектроскопии предложен механизм поляризации в полимерных пленках сополимера П(ВДФ-ТФЭ): при поляризации в поле коронного разряда происходит захват глубокими приповерхностными ловушками гомозаряда, который сам не вносит вклада в значение пьезомодуля. Однако во внутреннем электрическом поле гомозаряда возникает ориентация и имеет место удержание ориентированного состояния полярных структур. Увеличение температуры поляризации повышает вклад диполей с большей энергией активации (это наблюдается на кривых ТСД в виде двух сильно перекрывающихся пиков). Тем самым при поляризации пленок П(ВДФ-ТФЭ) в поле коронного разряда сосуществуют гомо- и гетерозаряды. При этом энергия активации полярных структур составляет $(0,82 \pm 0,03)$ эВ, а частотный фактор – 10^{10} с^{-1} (с точностью до половины декады). Значение энергии активации гомозаряда в случае отрицательной полярности коронирующего электрода намного превышает таковое для полярных структур и составляет $(1,90 \pm 0,09)$ эВ. Аналогичный расчет для случая положительной полярности коронирующего электрода дает значение энергии активации гомозаряда, равное $(1,20 \pm 0,06)$ эВ.

Таким образом установлено, что формирование электретного и пьезоэлектрического состояний в пленках П(ВДФ-ТФЭ) взаимосвязаны. Создание электретного состояния в этих объектах необходимо для появления и удержания пьезоэлектрических свойств.

Традиционный способ поляризации в поле коронного разряда при повышенной температуре часто приводит к электрическим пробоям, и, как следствие, к механическому повреждению полимерных пленок. Предложенный в настоящем исследовании способ поляризации во внутреннем поле гомозаряда значительно снижает вероятность электрического пробоя и позволяет достичь в пленках П(ВДФ-ТФЭ) значений пьезомодуля d_{33} , которые не уступают по своему уровню и температурной стабильности пьезомодулю d_{33} , полученному при поляризации данного объекта традиционным способом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kawai H. The piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) // Japanese Journal of Applied Physics. 1969. Vol. 8. No. 6. Pp. 975–983.
2. Лушейкин Г. А. Новые полимерсодержащие пьезоэлектрические материалы // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. № 6. С. 963–964.
3. Ting Y., Suprpto Y., Chiu C.-W., Gunawan H. Characteristic analysis of biaxially stretched PVDF thin films // Journal of Applied Polymer Science. 2018. Vol. 135. No. 36. P. 46677.

4. **Marandi M., Tarbutton J.** Additive manufacturing of single- and double-layer piezoelectric PVDF-TrFE copolymer sensors // *Procedia Manufacturing*. 2019. Vol. 34. Pp. 666–671.
5. **Begum S., Ullah H., Kausar A., Siddiq M., Aleem M. A.** Fabrication of epoxy functionalized MWCNTs reinforced PVDF nanocomposites with high dielectric permittivity, low dielectric loss and high electrical conductivity // *Composites Science and Technology*. 2018. Vol. 167. 20 October. Pp. 497–506.
6. **Kalimuldina G., Turdakyn N., Abay I., Medeubayev A., Nurpeissova A., Adair D., Bakenov Z.** A review of piezoelectric PVDF film by electrospinning and its applications // *Sensors*. 2020. Vol. 20. No. 18. P. 5214.
7. **Sukumaran S., Chatbouri S., Rouxel D., Tisserand E., Thiebaud F., Ben Zineb T.** Recent advances in flexible PVDF based piezoelectric polymer devices for energy harvesting applications // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2021. Vol. 32. No. 7. Pp. 746–780.
8. **Гороховатский Ю. А., Темнов Д. Э., Сотова Ю. И.** Влияние реологических параметров на электретные свойства поливинилиденфторида // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2020. Т. 13. № 4. С. 39–46.
9. **Mahadeva S. K., Berring J., Walus K., Stoeber B.** Effect of poling time and grid voltage on phase transition and piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) thin films using corona poling // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2013. Vol. 46. No. 28. P. 285305.
10. **Гороховатский Ю. А., Бордовский Г. А.** Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1991. 248 с.

REFERENCES

1. **Kawai H.**, The piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride), *Jap. J. Appl. Phys.* 8 (6) (1969) 975–983.
2. **Lushcheykin G. A.**, New polymer-containing piezoelectric materials, *Physics of the Solid State*. 48 (6) (2006) 1023–1025.
3. **Ting Y., Suprpto Y., Chiu C.-W., Gunawan H.**, Characteristic analysis of biaxially stretched PVDF thin films, *J. Appl. Polym. Sci.* 135 (36) (2018) 46677.
4. **Marandi M., Tarbutton J.**, Additive manufacturing of single- and double-layer piezoelectric PVDF-TrFE copolymer sensors, *Procedia Manuf.* 34 (2019) 666–671.
5. **Begum S., Ullah H., Kausar A., et al.**, Fabrication of epoxy functionalized MWCNTs reinforced PVDF nanocomposites with high dielectric permittivity, low dielectric loss and high electrical conductivity, *Comp. Sci. Technol.* 167 (20 October) (2018) 497–506.
6. **Kalimuldina G., Turdakyn N., Abay I., et al.**, A review of piezoelectric PVDF film by electrospinning and its applications, *Sensors*. 20 (18) (2020) 5214.
7. **Sukumaran S., Chatbouri S., Rouxel D., et al.**, Recent advances in flexible PVDF based piezoelectric polymer devices for energy harvesting applications, *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 32 (7) (2021) 746–780.
8. **Gorokhovatskiy Yu. A., Temnov D. E., Sotova Yu. I.**, Rheological parameters effect on the electric properties of polyvinylidene fluoride, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*. 13 (4) (2020) 39–46 (in Russian).
9. **Mahadeva S. K., Berring J., Walus K., Stoeber B.**, Effect of poling time and grid voltage on phase transition and piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) thin films using corona poling, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 2013. Vol. 46 (28) (2013) 285305.
10. **Gorokhovatskiy Yu. A., Bordovskiy G. A.**, Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков [Thermal activation spectroscopy of high-resistance semiconductors and dielectrics], *Nauka*, Moscow, 1991 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СОТОВА Юлия Ильинична – аспирантка кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
juliasotova1992@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6792-2390

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

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
gorokh-yu@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5085-2525

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

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
tde@ Herzen.spb.ru
ORCID: 0000-0002-9560-4346

THE AUTHORS

SOTOVA Yulia I.

Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia
juliasotova1992@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6792-2390

GOROKHOVATSKY Yuriy A.

Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia
gorokh-yu@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5085-2525

TEMNOV Dmitry E.

Herzen State Pedagogical University of Russia
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russia
tde@ Herzen.spb.ru
ORCID: 0000-0002-9560-4346

Статья поступила в редакцию 10.04.2022. Одобрена после рецензирования 12.04.2022. Принята 12.04.2022.

Received 10.04.2022. Approved after reviewing 12.04.2022. Accepted 12.04.2022.

Физическая электроника

Научная статья

УДК 537.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15202>

ХАОТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В ГЕТЕРОКОНТАКТАХ III-НИТРИДОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А. В. Филимонов ^{1✉}, **В. Б. Бондаренко** ¹, **Рави Кумар** ²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

² Индийский технологический институт Мадраса, г. Ченнаи, Индия

✉ filimonov@rphf.spbstu.ru

Аннотация. В работе исследуется высокотемпературная структура хаотического потенциала (ХП) в гетероконтактах III-нитридов, обусловленного электростатическим полем заряженных дислокаций. С учетом пространственной дисперсии диэлектрического отклика двумерного электронного газа определена амплитуда ХП в плоскости контакта. Показана зависимость свойств ХП от параметров системы. В частности, при наличии невырожденного двумерного электронного газа в гетероконтактах III-нитридов и плотности дислокаций 10^{10} см^{-2} (и более), величина амплитуды ХП превышает значение тепловой энергии.

Ключевые слова: хаотический потенциал, естественный размерный эффект, гетерокontakt III-нитридов, двумерный электронный газ

Финансирование: Исследование частично финансируется Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Договор 075-15-2021-1333 от 30.09.2021).

Для цитирования: Филимонов А. В., Бондаренко В. Б., Кумар Рави. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов при высоких температурах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 17–25. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15202>

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.15202>

A CHAOTIC POTENTIAL OF CHARGED DISLOCATIONS IN THE III-NITRIDE HETEROJUNCTIONS AT HIGH TEMPERATURES

A. V. Filimonov ^{1✉}, **V. B. Bondarenko** ¹, **Ravi Kumar** ²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

² Indian Institute of Technology – Madras (IIT Madras), Chennai, India

✉ filimonov@rphf.spbstu.ru

Abstract. The paper studies the high-temperature structure of a chaotic potential (CP) in-

duced in heterojunctions of the group III nitrides by the electrostatic field of charged dislocations. The CP amplitude in the junction plane has been obtained taking into account the spatial dispersion of a dielectric response of two-dimensional electron gas. The dependence of the CP properties on the parameters of the system was found. In particular, the magnitude of the CP amplitude exceeds that of the thermal energy, if the two-dimensional non-degenerate gas given in III-nitride heterojunctions and the dislocation densities being up to and over 10^{10} cm^{-2} .

Keywords: chaotic potential, natural size effect, III-nitride heterojunction, two-dimensional electron gas

Funding: The research is funded in part by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, within the framework of strategic academic leadership “Priority 2030” (Agreement No. 075-15-2021-1333 dated September 30, 2021)

For citation: Filimonov A. V., Bondarenko V. B., Kumar Ravi, A chaotic potential of charged dislocations in the III-nitride heterojunctions at high temperature, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 17–25. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15202>

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

Введение

Гетероконтакты на основе нитридов элементов третьей группы (Al, Ga, In) являются на настоящий момент и в перспективе основой для синтеза твердотельных приборов силовой СВЧ электроники [1]. Обладая целым рядом очевидных преимуществ перед структурами на основе других соединений $A^{III}B^V$, указанные системы в силу технологических особенностей синтеза содержат ряд несовершенств, влияющих, например, на параметры полевых транзисторов с двумерным электронным газом высокой подвижности (НЕМТ) [2]. Выявленные при этом изменения параметров приборов, возможно, связаны с исходной дефектностью материалов и формируемых гетерограниц. Известно, что из-за рассогласования решеток III-нитридов и используемых подложек исходно возникают прорастающие дислокации несоответствия, которые во многих случаях оказываются электрически заряженными [3]. Рассеяние же электронов в канале НЕМТ-транзистора на заряженных дислокациях приводит к известному снижению их подвижности [4 – 7]. Кроме того, влияние этого рассеяния может многократно возрасти на предельных значениях передаваемой мощности из-за снижения экранирующей способности двумерного электронного газа при высоких температурах, когда данная электронная подсистема перестает быть вырожденной. Отсутствие в этих условиях усреднения неоднородного поля заряженных дислокаций означает наличие флуктуаций напряженности и хаотического потенциала (ХП) в плоскости локализации двумерного электронного газа. При этом воздействие, обусловленное неоднородным электрическим полем системы линейно распределенных зарядов, ввиду конечности по величине плотности поверхностных состояний носит фактически самосогласованный характер. Наличие ХП влечет за собой появление «хвостов» плотности электронных состояний и частичной локализации носителей в проводящем канале НЕМТ-транзистора.

Цель настоящей работы – охарактеризовать ХП заряженных дислокаций в гетероконтактах полупроводниковых нитридных соединений через его параметры в условиях высокой температуры.

Распределение поля заряженных дислокаций

Для определенности рассмотрим индий-содержащую структуру InAlN/GaN [8], сохраняющую свою стабильность при рекордно высоких температурах (вплоть до 1000°C). Дислокации несоответствия с поверхностной концентрацией N_{disl} будем представлять в виде линейных дефектов, нормально ориентированных к плоскости контакта. При некоррелированной локализации указанных протяженных дефектов их количественное распре-



деление является пуассоновским, с параметром

$$\langle N \rangle = N_{disl} S,$$

определяющим среднее количество этих дефектов на участке контакта площадью S .

Поскольку каналный слой формируется на основе нелегированного (или компенсированного) нитрида галлия GaN, объемный заряд в приконтактной области изгиба зон формируется, в основном, заряженными дислокациями. При больших изгибах зон данные протяженные дефекты в пределах области пространственного заряда можно считать равномерно заряженными, с некоторой линейной плотностью λ максимальной величины. Если в гетероконтакте имеется делокализованный поверхностный заряд, то при высокой плотности поверхностных состояний D_s (более 10^{14} см $^{-2}$ ·эВ $^{-1}$) для определения параметров хаотического поля имеется возможность воспользоваться методом электростатических изображений [9].

Поле произвольно выбранной дислокации будем определять в цилиндрической системе координат, в которой ρ – радиальная координата, определяющая расстояние от дислокации в плоскости контакта. Несложный расчет дает величину напряженности поля заряженной дислокации в виде

$$F_i(\rho) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + L_0^2}} \right), \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды, в которой находится i -я дислокация; L_0 – ширина области пространственного заряда.

При условиях сильного вырождения двумерного электронного газа дальнейшее изложение может быть связано с анализом выражения (1) с учетом характера распределения дислокаций. Среднее значение (1) на площадке радиуса R определяется из выражения

$$\langle F_i \rangle(R) = \frac{4\lambda}{\varepsilon R^2} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (2)$$

Фактически выражение (2) определяет средний вклад одной заряженной дислокации в величину напряженности электростатического поля. Учитывая количественное распределение заряженных дислокаций, можно представить также среднее значение флуктуаций их количества на соответствующем участке поверхности площадью $S = \pi R^2$ в виде

$$\delta N(R) = R \sqrt{\pi N_{disl}}. \quad (3)$$

Произведением выражений (2) и (3) оценивается характерная величина неоднородностей напряженности поверхностного поля

$$\delta F(R) = \frac{4\lambda}{\varepsilon R} \sqrt{\pi N_{disl}} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (4)$$

Полученная функция (4) является монотонно убывающей и достигает своего максимального значения при $R \ll L_0$. Если вычислить точную верхнюю грань этой функциональной зависимости (в пределе $R \rightarrow 0$), то получим выражение для амплитуды хаотического поля:

$$\delta F = \frac{4\lambda \sqrt{\pi N_{disl}}}{\varepsilon}. \quad (5)$$

При указанных высоких значениях плотности поверхностных состояний возможна непосредственная оценка величины амплитуды ХП в плоскости локализации двумерного электронного газа. В этих условиях величина неоднородностей потенциала может быть определена в приближении Томаса – Ферми:

$$\delta\sigma = eD_s \cdot \delta U. \quad (6)$$

В данном случае предполагается малость возмущения потенциала, по сравнению со средней энергией электрона в поверхностной зоне, и пренебрегается изменением плотности состояний.

Учитывая далее линейную зависимость поверхностного заряда от напряженности поля $F = 4\pi\sigma/\varepsilon$, а также выражения (5) и (6), можно связать величину δU с параметрами системы:

$$\delta U = \frac{\lambda}{eD_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{disl}}{\pi}}. \quad (7)$$

Случай малой плотности электронных состояний

В случае относительно невысоких значений плотности электронных состояний в гетероконтакте, следует провести более детальный анализ возникающих флуктуаций потенциала с использованием функции диэлектрического отклика поверхностной подсистемы. Потенциальная энергия поверхностного электрона в поле заряженной дислокации без реакции среды имеет вид

$$V_i(\rho) = e\lambda \cdot \ln \frac{\sqrt{\rho^2 + L_0^2} + \rho}{\rho}. \quad (8)$$

С учетом преобразования (8) по Фурье – Бесселю [10] в пространстве волновых векторов q имеем выражение

$$V_i(q) = \frac{e\lambda}{q^2} \cdot [1 - \exp(-qL_0)]. \quad (9)$$

В области высоких температур (т. е. при классической статистике двумерного электронного газа) функция диэлектрического отклика имеет следующий вид [11]:

$$\varepsilon(q) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \cdot \left[1 + \frac{q_s(q)}{q} \right], \quad (10)$$

где $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – величины диэлектрической проницаемости контактирующих полупроводников; $q_s(q)$ – параметр экранирования в двумерной электронной системе.

В случае больших изгибов зон, для большинства гармоник справедливо также соотношение $q \ll q_s$, при котором функцию диэлектрического отклика (10) можно приближенно представить в виде [12]:

$$\varepsilon(q) \approx \frac{2\pi e^2 n_s}{kT \cdot q}. \quad (11)$$

Используя вид исходного потенциала (9), обратное преобразование Фурье – Бесселя и выражение для диэлектрического отклика системы (11), получаем выражение для потенциальной энергии электрона в плоскости поверхности, с учетом экранирования:

$$U_i(\rho) = \frac{\lambda kT}{2\pi e n_s} \cdot \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + L_0^2}} \right). \quad (12)$$

Эта функциональная зависимость потенциальной энергии от радиальной координаты совпадает с аналогичной зависимостью (1), что дает возможность повторить ранее использованный алгоритм вычислений уже непосредственно для определения амплитуды ХП:

$$\delta U = \frac{\lambda kT}{e n_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{disl}}{\pi}}. \quad (13)$$



Полученное выражение может еще не носить окончательного характера, поскольку требует в ряде случаев доопределения концентрации двумерного электронного газа через параметры ХП, т. е. установить функциональную зависимость $n_s = n_s(\delta U)$.

Значение величины концентрации двумерного электронного газа зависит от плотности электронных состояний $D(E)$. Поскольку при параболическом законе дисперсии плотность поверхностных состояний исходно является константой, в присутствии ХП она имеет вид [13]:

$$D(E) = D_s \int_{-\infty}^E p(U) dU, \quad (14)$$

где $p(U)$ – плотность распределения ХП.

В случае Гауссова распределения с параметром среднеквадратичного отклонения, равным δU , вычисление интеграла в формуле (14) приводит к известному из теории вероятности результату через функцию ошибок:

$$D(E) = \frac{D_s}{2} \cdot \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E}{\delta U \sqrt{2}} \right) \right]. \quad (15)$$

Концентрация двумерного электронного газа в контакте определяется интегрированием по всем заполненным состояниям:

$$n_s = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E) dE. \quad (16)$$

Для высокотемпературного предела следует выбрать больцмановский закон распределения электронов по энергиям

$$f(E) \approx \exp \left[(\mu - E) / kT \right],$$

где μ – химический потенциал, отсчитываемый от дна невозмущенной поверхностной зоны электронных состояний.

С учетом вида выражения для плотности возмущенных состояний (15), из выражения (16) получаем следующую формулу [9]:

$$n_s = D_s kT \cdot \exp \left[\frac{\mu}{kT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta U}{kT} \right)^2 \right]. \quad (17)$$

Таким образом, для определения величины амплитуды ХП необходимо решить трансцендентное уравнение, которое получается при подстановке формулы (17) в выражение (13):

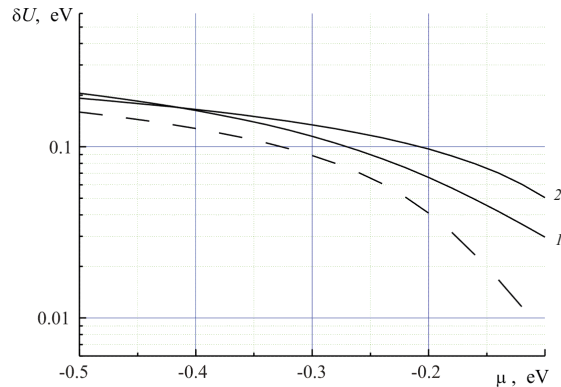
$$\delta U = \frac{\lambda}{eD_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{disl}}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{\mu}{kT} - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta U}{kT} \right)^2 \right]. \quad (18)$$

Результаты расчета величин δU и n_s для типичных значений параметров системы представлены на рис. 1.

Обсуждение результатов

Подведем некоторые итоги представленного анализа. Заметим прежде всего, что выражение (13) для характерных величин неоднородности поверхностного потенциала при высоких температурах могло быть получено из выражения (7) путем замены величины плотности состояний D_s отношением n_s / kT . При оценках значений δU для параметров ХП в гетероконтактах на основе III-нитридов примем величину эффективной массы электрона в поверхностной зоне $m^* \approx 0,2 m$ (m – масса покоя электрона) и соответствующее значение плотности невозмущенных поверхностных состояний $D_s \approx 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$. Если при этом полагать, что концентрация дислокаций у границы раздела составляет порядка 10^{10} см^{-2} , несущих максимальный заряд на единицу длины около 0,01 ед. СГСЭ, то при наличии невырожденного двумерного электронного газа в широком диапазоне отрицатель-

a)



b)

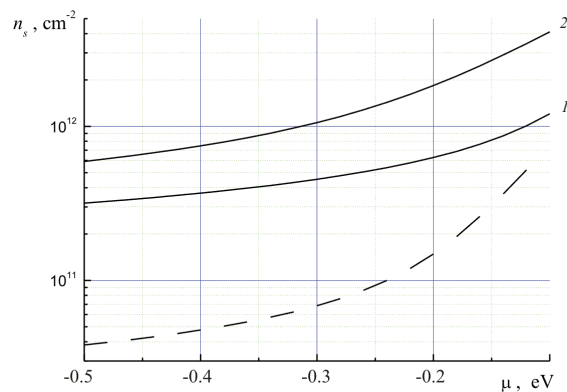


Рис 1. Зависимости амплитуды хаотического потенциала заряженных дислокаций (a) и концентрации двумерного электронного газа (b) в гетероконтакте III-нитридов от величины химического потенциала для двух значений температуры, К: 600 (кривые 1 и пунктиры) и 1200 (2); $N_{disl} = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (1, 2) и 10^8 см^{-2} (пунктиры); $\lambda = 0,01$ ед. СГСЭ, $D_s \approx 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$

ных значений химического (электрохимического – при подаче запирающего напряжения на затвор транзистора) потенциала, значения величины δU превышают таковые для тепловой энергии kT . В режимах работы НЕМТ-транзистора, близких к отсечке, амплитуда ХП может составлять более 100 мэВ даже при существенно меньшей концентрации дислокаций (см. пунктирную кривую на рис. 1, a). Соответствующие значения концентрации двумерного электронного газа при этом уменьшаются на один-два порядка относительно исходных (около 10^{13} см^{-2}) (рис. 1, b).

Заключение

В работе проанализированы особенности ХП в гетероконтактах нитридов третьей группы, индуцированного электростатическим полем дислокаций, присутствующих в материале и несущих электрический заряд. При высоких температурах с учетом пространственной дисперсии диэлектрического отклика двумерного электронного газа определена амплитуда ХП в плоскости контакта. Изучена зависимость свойств ХП от параметров системы. Главным выводом работы следует считать тот факт, что при наличии невырожденного двумерного электронного газа в гетероконтактах III-нитридов и плотности дислокаций 10^{10} см^{-2} (и более) величина амплитуды ХП превышает уровень тепловой энергии. Данный результат следует учитывать при разработке аппаратуры на основе соответствующих полупроводниковых приборов.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров С. Б., Баранов Д. А., Кайдаш А. П. и др. Сверхвысокочастотные полевые транзисторы на основе нитридов III группы // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 10. С. 1275–1279.
2. Емцев В. В., Заварин Е. Е., Оганесян Г. А. и др. Взаимосвязь надежности AlGaIn/GaN транзисторов с характером организации наноматериала // Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42. № 13. С. 80–86.
3. Шикин В. Б., Шикина Ю. В. Заряженные дислокации в полупроводниковых кристаллах // Успехи физических наук. 1995. Т. 165. № 8. С. 887–917.
4. Weimann N. G., Eastman L. F., Doppalapudi D., Ng H. M., Maustakus T. D. Scattering of electrons at threading dislocations in GaN // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 83. No. 7. Pp. 3656–3659.
5. Debdeep J., Gossard A. C., Mishra U. K. Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas // Applied Physics Letters. 2000. Vol. 76. No. 13. Pp. 1707–1709.
6. Протасов Д. Ю., Малин Т. В., Тихонов А. В., Цацульников А. Ф., Журавлев К. С. Рассеяние электронов в гетероструктурах AlGaIn/GaN с двумерным электронным газом // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. № 1. С. 36–47.
7. Bondarenko V. B., Davydov S. N., Nacke B., Filimonov A. V. Chaotic potential on the degenerated semiconductor surface // Key Engineering Materials. 2019. Vol. 806. Pp. 17–23.
8. Medjdoub F., Carlin J. F., Gaquiere C., Grandjean N., Kohn E. Status of the emerging InAlIn/GaN power HEMT technology // The Open Electrical and Electronic Engineering Journal. 2008. Vol. 2. Pp. 1–7.
9. Бондаренко В. Б., Филимонов А. В., Kumar R. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 1. С. 12–14.
10. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. 1108 с.
11. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
12. Бондаренко В. Б., Давыдов С. Н., Филимонов А. В. Естественные неоднородности потенциала на поверхности полупроводника при равновесном распределении примеси // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. № 1. С. 44–47.
13. Бондаренко В. Б., Филимонов А. В. Критерий сильной локализации на поверхности полупроводника в приближении Томаса – Ферми // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51. № 10. С. 1372–1375.

REFERENCES

1. Aleksandrov S. B., Baranov D. A., Kaydash A. P., et al., Microwave field-effect transistors based on group-III nitrides, Semiconductors. 38 (10) (2004) 1235–1239.
2. Emtsev V. V., Zavarin E. E., Oganesyanyan G. A., et al., Relationship between the reliability of transistors with 2D AlGaIn/GaN channel and organization type of nanomaterial, Techn. Phys. Lett. 42 (7) (2016) 701–703.
3. Shikin V. B., Shikina Yu. V., Charged dislocations in semiconductor crystals, Phys. Usp. 38 (8) (1995) 845–875.
4. Weimann N. G., Eastman L. F., Doppalapudi D., et al., Scattering of electrons at threading dislocations in GaN, J. Appl. Phys. 83 (7) (1998) 3656–3659.
5. Debdeep J., Gossard A. C., Mishra U. K., Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas, Appl. Phys. Lett. 76 (13) (2000) 1707–1709.
6. Protasov D. Y., Malin T. V., Tikhonov A. V., et al., Electron scattering in AlGaIn/GaN heterostructures with a two-dimensional electron gas, Semiconductors. 47 (1) (2013) 33–44.
7. Bondarenko V. B., Davydov S. N., Nacke B., Filimonov A. V., Chaotic potential on the degenerated semiconductor surface, Key Eng. Mater. 806 (2019) 17–23.
8. Medjdoub F., Carlin J. F., Gaquiere C., et al., Status of the emerging InAlIn/GaN power HEMT technology, Open Electr. Electron. Eng. J. 2 (2008) 1–7.

9. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V., Kumar R.**, A chaotic potential of charged dislocations in group III-nitride heterojunctions, *Techn. Phys. Lett.* 47 (1) (2021) 8–10.
10. **Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M.**, Table of integrals, series, and products, 17-th edition, Ed. by A. Jeffrey, D. Zwillinger, Academic Press; Amsterdam, Boston, Heidelberg, London, 2007.
11. **Ando T., Fowler A. B., Stern F.**, Electronic properties of two-dimensional systems, *Rev. Mod. Phys.* 54 (2) (1982) 437– 672.
12. **Bondarenko V. B., Davydov S. N., Filimonov A. V.**, Inherent potential inhomogeneity on the semiconductor surface for equilibrium impurity distribution, *Semiconductors.* 44 (1) (2010) 41–44.
13. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V.**, Criterion for strong localization on a semiconductor surface in the Thomas – Fermi approximation, *Semiconductors.* 51 (10) (2017) 1321–1325.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, соруководитель Научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

БОНДАРЕНКО Вячеслав Борисович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vyacheslav.b.bondarenko@mail.ru
ORCID: 0000-0002-9357-3902

КУМАР РАВИ Н. В. – *Ph.D.*, профессор, заведующий кафедрой металлургии и материаловедения Индийского технологического института Мадраса (ИИТ Мадрас), г. Ченнаи, Индия.

ИИТ Р.О., Chennai, Tami Nadu, 600036, India
nvrk@iitm.ac.in
ORCID: 0000-0001-6856-6092

THE AUTHORS

FILIMONOV Alexey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
filimonov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

BONDARENKO Vyacheslav B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vyacheslav.b.bondarenko@mail.ru
ORCID: 0000-0002-9357-3902

KUMAR RAVI N. V.

Indian Institute of Technology – Madras (IIT Madras)
ИИТ Р.О., Chennai, Tami Nadu, 600036, India
nvrk@iitm.ac.in
ORCID: 0000-0001-6856-6092



*Статья поступила в редакцию 11.04.2022. Одобрена после рецензирования 13.05.2022.
Принята 13.05.2022.*

Received 11.04.2022. Approved after reviewing 13.05.2022. Accepted 13.05.2022.

Научная статья
УДК 537.533.7, 537.534.7, 681.2.084
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15203>

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТРЕХМЕРНОЙ ЗОНЫ УСТОЙЧИВОСТИ КВАДРУПОЛЬНОГО ФИЛЬТРА МАСС В ПОСТОЯННОМ ПРОДОЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**А. С. Бердников¹, Н. К. Краснова²,
С. В. Масюкевич¹, К. В. Соловьев^{2,1✉}**

¹ Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия;

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

✉ k-solovyev@mail.ru

Аннотация. Предложен новый способ визуализации трехмерной зоны устойчивости иона в квадрупольном масс-фильтре, помещенном в однородное постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси квадруполя. Трехмерная зона представлена набором двумерных сечений, каждое из которых является аналогом двумерной зоны устойчивости электрического квадруполя с периодическим питанием. Применен способ уточненного определения границ областей устойчивости для двумерных сечений. Результаты могут быть использованы как в ходе проектирования новых масс-спектрометрических приборов, так и для анализа устойчивости периодических динамических систем.

Ключевые слова: квадрупольный масс-фильтр, масс-спектрометрия, зона устойчивости, теория Флоке

Финансирование: работа частично выполнена в рамках НИОКТР FFZM-2022-0009, входящей в состав гос. задания No 075-00761-22-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ИАП РАН.

Для цитирования: Бердников А. С., Краснова Н. К., Масюкевич С. В., Соловьев К. В. Визуализация трехмерной зоны устойчивости квадрупольного фильтра масс в постоянном продольном магнитном поле // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 26–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15203>

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.15203>

VISUALIZATION OF THE 3D STABILITY ZONE OF A QUADRUPOLE MASS FILTER IN THE STATIC LONGITUDINAL MAGNETIC FIELD

**A. S. Berdnikov¹, N. K. Krasnova²,
S. V. Masyukevich¹, K. V. Solovyev^{2,1✉}**

¹ Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russia;



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

✉ k-solovyev@mail.ru

Abstract. A new visualization method has been put forward to show the three-dimensional stability zones of a quadrupole mass filter placed in the constant uniform magnetic field directed along the quadrupole axis. The three-dimensional zone was represented by a set of two-dimensional sections each of which being an analogue of a stability two-dimensional zone of an intermittent electric quadrupole. The procedure for redetermining the boundaries of stability regions for the two-dimensional sections was applied. The results obtained can be used both in design of new mass spectrometers and in analyses of periodic dynamic system stability.

Keywords: quadrupole mass filter, mass spectrometry, stability zone, Floquet theory

Funding: The research was partially funded within the Research Work No. FFZM-2022-0009 being a part of The State Assignment No. 075-00761-22-00 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation to the Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences.

For citation: Berdnikov A. S., Krasnova N. K., Masyukevich S. V., Solovyev K. V., Visualization of the 3D stability zone of a quadrupole mass filter in the static longitudinal magnetic field, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 26–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15203>

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

Введение

Квадрупольный масс-спектрометр, предложенный В. Паулем еще в 1953 году [1], по-прежнему весьма востребован в ряде приложений. Попытки улучшить его характеристики включают, в том числе, размещение прибора в магнитном поле, а в простейшем варианте – в постоянном однородном. Вопрос об условиях стабильности заряженной частицы в получаемой полевой комбинации – первоочередной для понимания принципа функционирования прибора. Имеются работы, отвечающие на вопрос об устойчивости иона в системе с однородным постоянным магнитным полем, направленным ортогонально оси квадруполя [2, 3]; при этом авторы эксплуатируют сведения о зонах устойчивости уравнения Матье (см., например, книги [7, 8]). Однако в большинстве публикаций (см., например, статьи [4 – 6]) устойчивость ионов предварительно не исследуется, а сразу изучается пропускание идеализированного прибора при различных направлениях вектора магнитного поля путем численного анализа движения большого количества заряженных частиц. Между тем имеется возможность изучить характер движения ионов, применяя аналитические средства теории Флоке [8 – 10, 15], поскольку для рассматриваемой системы «квадруполь плюс постоянное однородное магнитное поле» сохраняется линейность системы уравнений движения. Подход с использованием указанной теории позволяет непосредственно прояснить вопросы устойчивости движения ионов и, соответственно, упростить исследование системы и сделать предположения об оптимальных режимах ее работы.

Стандартный подход к исследованию устойчивости движения иона в системах с периодическим питанием, описываемых линейными дифференциальными уравнениями движения, предполагает разделение движений по координатам с последующим анализом уравнений Хилла по каждой из результирующих координат и комбинированием (наложением) зон устойчивости по всем учитываемым направлениям движения (см., например, работы [9 – 12]). При этом размерность зоны устойчивости определяется количеством параметров, влияющих на устойчивость движения иона. Обычно параметры связаны с электрическим питанием ионно-оптической системы.

Цель настоящей работы состоит в построении трехмерных зон устойчивости системы уравнений поперечного движения ионов в электрическом поле квадруполя с периодическим питанием и постоянном продольном магнитном поле.

Определение сечений трехмерной зоны устойчивости системы

Рассмотрим в качестве примера вариант, который не сводится к ситуации с разделенными одномерными движениями, а именно – случай квадруполя в однородном магнитном поле. Отметим, что использованный здесь подход впервые применен в нашей работе [16], и к настоящему моменту авторам удалось продвинуться как в улучшении качества аппроксимации границ двумерных зон устойчивости (благодаря использованию алгоритма, предложенного в докладе [17]), так и в понимании требуемого принципа действия прибора за счет перехода к представлению трехмерных зон устойчивости в виде набора плоских сечений с дискретизацией по углу между плоскостями.

Для удобства дальнейшего изложения введем безразмерные единицы измерения [16], полагая, что размерные координаты $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$ и время t связаны с соответствующими безразмерными координатами $\mathbf{r} = (x, y, z)$ и временем τ следующими соотношениями:

$$\mathbf{R} = \ell \mathbf{r}, t = T \tau, \quad (1)$$

где ℓ, T – выбранные линейный и временной масштабы.

Движение частицы заряда e и массы m происходит в однородном постоянном магнитном поле

$$\mathbf{B} = B_0(b_1, b_2, b_3), \quad b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 = 1, \quad (2)$$

и электрическом поле с периодическим питанием

$$U = [U_0 - U_1 f(\omega t)] \frac{X^2 - Y^2}{\ell^2}, \quad f(\omega(t + \alpha)) = f(\omega t). \quad (3)$$

Система уравнений движения в указанных полях в безразмерной форме имеет вид

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -[a - 2q \cdot f(2\tau)]x + \lambda (\dot{y}b_3 - \dot{z}b_2), \\ \ddot{y} &= [a - 2q \cdot f(2\tau)]y + \lambda (\dot{z}b_1 - \dot{x}b_3), \\ \ddot{z} &= \lambda (\dot{x}b_2 - \dot{y}b_1), \end{aligned} \quad (4)$$

с коэффициентами a, q, λ , определяемыми при выборе масштаба времени $T = 2 / \omega$ следующими соотношениями:

$$a = \frac{8eU_0}{\omega^2 m \ell^2}, \quad q = \frac{4eU_1}{\omega^2 m \ell^2}, \quad \lambda = \frac{2eB_0}{\omega m}. \quad (5)$$

Точки над переменными в уравнениях (4) обозначают кратное дифференцирование по времени τ . Система (4) имеет пять независимых параметров, влияющих на устойчивость: традиционные a и q , а также новые – параметр λ , связанный с величиной магнитного поля, и параметры, связанные с направлением магнитного поля, которые условно ассоциированы с полярным и азимутальными углами вектора \mathbf{B} относительно системы координат, привязанной к геометрии электрического квадруполя. Визуализации пятимерной зоны возможна, очевидно, лишь сечениями с размерностями не более трех.

Если магнитное поле $\mathbf{B} = B_0(0, 0, 1)$ направлено вдоль оси квадруполя, то система (4) упрощается:

$$\ddot{x} = -[a - 2q \cdot f(2\tau)]x + \lambda \dot{y}, \quad (6)$$

$$\ddot{y} = [a - 2q \cdot f(2\tau)]y - \lambda \dot{x},$$

$$\ddot{z} = 0. \quad (7)$$

Количество параметров сокращается в этом случае до трех, и визуализация зоны устойчивости становится реальной. Уравнение (7) определяет дрейфовое движение по координате z . В случае отсутствия магнитного поля ($\lambda = 0$) два уравнения системы (6) изолированы друг от друга и решаются независимо. Если же $\lambda \neq 0$, необходимо совместное решение этих уравнений.

Принцип действия масс-сепаратора на базе данной комбинации полей использует одновременную устойчивость решений уравнений (6) для параметров a , q , λ , лежащих в некоторых диапазонах, определяющих при постоянстве других величин, входящих в соотношения (5), диапазон масс, пропускаемых прибором. Построение трехмерных зон устойчивости, таким образом, возможно, например, через последовательный анализ устойчивости системы на множестве дискретных значений параметров (a, q, λ) , заданных в некоторой трехмерной области с шагами по параметрам соответственно $(\Delta a, \Delta q, \Delta \lambda)$. Для нулевого магнитного поля ($\lambda = 0$) имеем плоскость (a, q) с традиционными двумерными диаграммами устойчивости.

Определение устойчивости системы (6), в соответствии с теорией Флоке [8, 15], базируется на анализе мультипликаторов s_i — собственных чисел матрицы монодромии нормальной системы, сформированной из уравнений системы (6). Ввиду периодичности матрицы нормальной системы, устойчивость движения гарантируется тогда, когда каждый из ее мультипликаторов лежит в единичном круге $|s| \leq 1$, причем мультипликаторы, лежащие на окружности $|s| = 1$, не являются кратными корнями соответствующего характеристического уравнения [8].

Построим далее двумерную диаграмму совместной области устойчивости уравнений (6) с косинусоидальным питанием и постоянным значением параметра магнитного поля $\lambda = 0,3$ (рис. 1). Черные точки маркируют устойчивые узлы сетки (q, a) , ограничивающие линии интерполируют уточненные точки границы. Уточнение (проколотые точки) происходит согласно алгоритму, приведенному в нашем докладе [17] и состоящему в анализе величины

$$S(q) = \max_i |s_i(q)|$$

для прилежащих к границе значений параметра q .

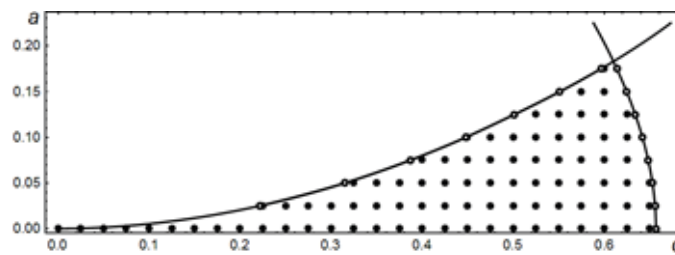


Рис. 1. Уточнение границы зоны устойчивости уравнений (6) путем анализа мультипликаторов: черные точки маркируют устойчивые узлы сетки (q, a) , ограничивающие линии интерполируют уточненные точки границы

Область устойчивости характеризуется значениями $S(q) \leq 1$. Вне области устойчивости $S(q) > 1$ и $S(q) \rightarrow 1$ при стремлении q к значению, соответствующему граничному при заданных a и λ . Уточнение границы возможно как методом бисекции, так и путем квадратичной интерполяции зависимости $q(S)$ в области неустойчивости, примыкающей к границе. Результаты, приведенные на рис. 1, легко подтверждаются прямым вычислением траекторий для параметров, лежащих внутри / вне зоны устойчивости.

В случае реализации масс-анализатора на базе системы, определяемой уравнениями (6), (7) по традиционному принципу, применяемому в квадрупольном фильтре масс (временная развертка амплитуд электрического поля), целесообразно найти сечение трехмерной области устойчивости плоскостью, включающей ось a и образующей некоторый угол φ с плоскостью $\lambda = 0$, с последующим построением рабочей прямой (см. книги [9, 10]) в указанной плоскости, связывающей параметры q и λ . При этом необходима также синхронизированная (с питанием электрического квадрупольного поля) развертка магнитного поля. Смысл этой процедуры состоит в обеспечении пропорциональности изменения параметров a , q , λ при изменении массы фильтруемых ионов. Заметим, что частотная развертка здесь вряд ли возможна ввиду различия степени зависимости параметров от частоты.

Визуализация трехмерной зоны устойчивости посредством дискретного набора двумерных проекций, соответствующих различным углам φ , представлена на рис. 2. На одном

из сечений размещена рабочая прямая. Для удобства сравнительной оценки целесообразности выбора того или иного угла φ , на рис. 3 границы зон всех проекций размещены на одном чертеже. Предложенное размещение рабочей прямой, хотя и нельзя считать оптимальным (строгой оптимизации по параметру φ не проводилось), однако имеет шанс повысить разрешающую способность прибора вследствие сужения проекции зоны.

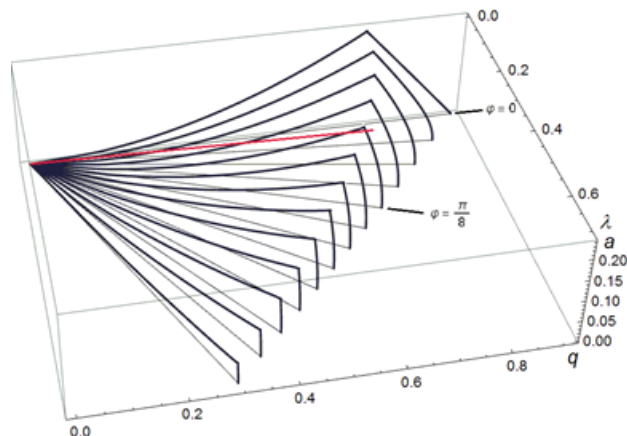


Рис. 2. Сечение трехмерной зоны устойчивости системы (6) плоскостями $\varphi = \text{const}$, проведенными через ось a ; отсчет угла φ – от плоскости $\lambda = 0$. Величина φ меняется от 0 до $3\pi/8$ с шагом $\pi/32$. Рабочая прямая выделена красным цветом

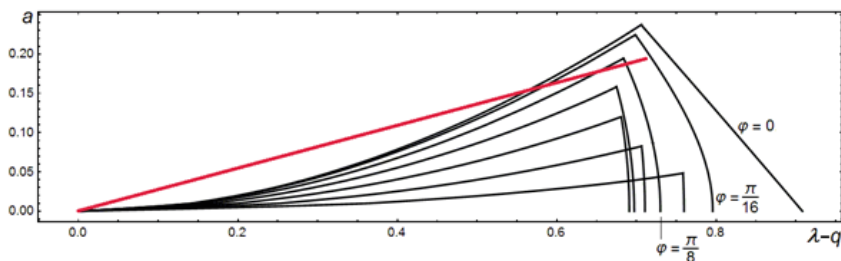


Рис. 3. Пример сравнительной оценки выбора угла φ : сечения, приведенные на рис. 2, спроецированы на одну плоскость, шаг по φ увеличен вдвое (φ меняется от 0 до $3\pi/8$ с шагом $\pi/16$)

Заключение

Таким образом, в данной статье впервые представлены результаты построения трехмерных зон устойчивости системы уравнений поперечного движения ионов в электрическом поле квадруполя с периодическим питанием в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси квадруполя. Приведенные данные получены на основе теории Флоке.

Результаты представлены в виде набора сечений в координатах (a, q, λ) – плоскостей, проходящих через ось a ; указанные координаты – суть параметры уравнения Матье, дополненные нормированной величиной магнитного поля.

Такое представление результатов позволяет перенести на данный (трехмерный) случай методику определения диапазона масс ионов, пропускаемого фильтром, которая традиционно применяется в двумерном случае.

Авторы публично заявляют, что у них нет конфликта интересов, в том числе и финансовых.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Paul W., Steinwedel H. Ein neues Massenspektrometer ohne Magnetfeld // Zeitschrift für Naturforschung. 1953. Vol. 8a. No. 7. Pp. 448–450.
2. Павленко Ю. Г., Торопова А. И. Новый масс-спектрометр – квадруполь в магнитном поле // Радиотехника и электроника. 1996. Т. 41. № 4. С. 508–512.
3. Sarfarazi S., Sohani M. Magnetic field effect on the stability regions of a linear quadrupole // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2020. Vol. 34. No. 12. P. e8784 (1–6).
4. Syed S. U., Sreekumar J., Brkic B., Gibson J. R., Taylor S. Effect of an axial magnetic field on the performance of a quadrupole mass spectrometer // Journal of the American Society for Mass Spectrometry. 2010. Vol. 21. No. 8. Pp. 2070–2076.
5. Maher S., Syed S. U., Hughes D. M., Gibson J. R., Taylor S. Mapping the stability diagram of a quadrupole mass spectrometer with a static transverse. Magnetic field applied // Journal of the American Society for Mass Spectrometry. 2013. Vol. 24. No. 8. Pp. 1307–1314.
6. Syed S. U. A. H., Maher S., Taylor S. Quadrupole mass filter operation under the influence of magnetic field // Journal of Mass Spectrometry. 2013. Vol. 48. No. 12. Pp. 1325–1339.
7. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976. 576 с.
8. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 471 с.
9. Слободенюк Г. И. Квадрупольные масс-спектрометры. М.: Атомиздат, 1974. 272 с.
10. Dawson P. H. (editor). Quadrupole mass spectrometry and its application. New York: AIP Press, 1995. 349 p.
11. March R. E., Todd J. F. J. Quadrupole ion trap mass spectrometry. 2nd ed. New Jersey, USA: J. Wiley & Sons, Inc. Hoboken, 2005. 346 p.
12. Major F. G., Gheorghe V. N., Werth G., Charged particle traps. Berlin, Heidelberg: Springer – Verlag, 2005. 354 p.
13. Стретт М. Д. О. Функции Ляме, Матье и родственные им в физике и технике. С приложением таблиц функций Матье, составленных Айнсом. Пер. с нем. Харьков-Киев: Научно-техническое издательство Украины, 1935. 237 с.
14. Pipes L. A. Matrix solution of equations of the Mathieu – Hill type // Journal of Applied Physics. 1953. Vol. 24. No. 7. Pp. 902–910.
15. Floquet G. Sur les équations différentielles linéaires a coefficients périodiques // Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure. 2e Serie, 1883. Tome 12. Pp. 47–88.
16. Голиков Ю. К., Краснова Н. К., Соловьев К. В., Елохин В. А., Николаев В. И. Зоны устойчивости квадрупольного масс-спектрометра в продольном магнитном поле // Прикладная физика. 2006. № 3. С. 78–81.
17. Berdnikov A., Kapralov V., Solovyev K., Krasnova N. Algorithm for constructing a multidimensional stability domain of a charged particle in an ion-optical system with periodic supply voltage // Proceedings of 2021 IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EEExPolytech-2021), October 14–15, 2021. St. Petersburg, Russia. Pp. 51–54.

REFERENCES

1. Paul W., Steinwedel H., Ein neues Massenspektrometer ohne Magnetfeld, Z. Naturforschung. 8a (7) (1953) 448–450.
2. Pavlenko Yu. G., Toropova A. I., A new mass-spectrometer: A quadrupole in a magnetic field, J. Commun. Technol. Electronics. 41 (5) (1996) 471–475.
3. Sarfarazi S., Sohani M., Magnetic field effect on the stability regions of a linear quadrupole, Rapid Commun. Mass Spectrom. 34 (12) (2020) e8784 (1–6).
4. Syed S. U., Sreekumar J., Brkic B., et al., Effect of an axial magnetic field on the performance of a quadrupole mass spectrometer, J. Am. Soc. Mass. Spectrom. 21 (8) (2010) 2070–2076.
5. Maher S., Syed S. U., Hughes D. M., et al., Mapping the stability diagram of a quadrupole mass spectrometer with a static transverse. Magnetic field applied, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 24 (8) (2013) 1307–1314.
6. Syed S. U. A. H., Maher S., Taylor S., Quadrupole mass filter operation under the influence of magnetic field, J. Mass Spectrom. 48 (12) (2013) 1325–1339.

7. **Kamke E.**, Differentialgleichungen Lösungsmethoden und Lösungen, Band 1. 10 ed. B. G. Teubner, Springer, Leipzig, 1977.
8. **Demidovich B. P.**, Lektsii po matematicheskoy teorii ustoychivosti [Lectures on the mathematical stability theory], Nauka, Moscow, 1967 (in Russian).
9. **Slobodenyuk G. I.**, Kvadrupolnyye mass-spektrometry [Quadrupole mass spectrometers], Atomizdat, Moscow, 1974 (in Russian).
10. **Dawson P. H.** (editor), Quadrupole mass spectrometry and its application, AIP Press, New York, USA, 1995.
11. **March R. E., Todd J. F. J.**, Quadrupole ion trap mass spectrometry, 2nd ed. J. Wiley & Sons, Inc. Hoboken, New Jersey, USA, 2005.
12. **Major F. G., Gheorghe V. N., Werth G.**, Charged particle traps, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005.
13. **Strett M. D. O.**, Funktsii Lyame, Matye i rodstvennyye im v fizike i tekhnike [Lamé and Mathieu functions and related ones in physics and technology], Sci. & Techn. Publish. House of Ukraine, Kharkov, Kiev, 1935 (in Russian).
14. **Pipes L. A.**, Matrix solution of equations of the Mathieu – Hill type, J. Appl. Phys. 24 (7) (1953) 902–910.
15. **Floquet G.**, Sur les équations différentielles linéaires a coefficients périodiques, Ann. Sci. Éc. Norm. Supér. 2e Serie, 12 (1883) 47–88.
16. **Golikov Yu. K., Krasnova N. K., Solovyev K. V., et al.**, Stability zones of quadrupole mass spectrometer in longitudinal magnetic field, Appl. Phys. (Prikladnaya fizika). (3) (2006) 78–81 (in Russian).
17. **Berdnikov A., Kapralov V., Solovyev K., Krasnova N.** Algorithm for constructing a multidimensional stability domain of a charged particle in an ion-optical system with periodic supply voltage. In: Proc. of 2021 IEEE Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech-2021), October 14–15, 2021. St. Petersburg, Russia. (2021) 51–54.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Россия.

190103, Россия, Санкт-Петербург, Рижский пр., 26
 asberd@yandex.ru
 ORCID: 0000-0003-0985-5964

КРАСНОВА Надежда Константиновна – 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
 n.k.krasnova@mail.ru
 ORCID: 0000-0002-6162-9481

МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович – старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Россия.

190103, Россия, Санкт-Петербург, Рижский пр., 26
 serg_08@mail.ru
 ORCID: 0000-0002-0873-8849

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
 k-solovyev@mail.ru
 ORCID: 0000-0003-3514-8577

THE AUTHORS**BERDNIKOV Alexander S.**

Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences

26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russia

asberd@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-0985-5964

KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

n.k.krasnova@mail.ru

ORCID: 0000-0002-6162-9481

MASYUKEVICH Sergey V.

Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences

26, Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russia

serg_08@mail.ru

ORCID: 0000-0002-0873-8849

SOLOVYEV Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

k-solovyev@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3514-8577

*Статья поступила в редакцию 18.04.2022. Одобрена после рецензирования 28.04.2022.
Принята 28.04.2022.*

Received 18.04.2022. Approved after reviewing 28.04.2022. Accepted 28.04.2022.

Научная статья

УДК 620.186: 539.378:537.622

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15204>

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Nd-Pr-Fe-B, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ И МАГНИТНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

И. С. Терёшина^{1, 5}, Г. А. Политова^{2, 4}✉, Т. П. Каминская¹,
В. В. Попов¹, Д. В. Гундеров³, А. В. Филимонов⁴, И. А. Пелевин⁵

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
г. Москва, Россия;

² Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН,
г. Москва, Россия;

³ Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН,
г. Уфа, Россия;

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия;

⁵ Национальный исследовательский технологический университет
«Московский институт стали и сплавов (МИСиС)», г. Москва, Россия

✉ gpolitova@gmail.com

Аннотация. В работе получены и исследованы на микро- и наноуровне поликристаллические образцы магнитотвердых материалов общей формулы $(Nd_{1-x}Pr_x)_2Fe_{14}B$, подвергнутые процедуре интенсивной пластической деформации (ИПД). Для контроля особенностей формирования наноструктуры соединений до и после ИПД использовались методы атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии (АСМ и МСМ). При изучении поверхностей как исходных, так и деформированных образцов были выявлены различия в текстурообразовании. Для исходных образцов, полученных с помощью метода Чохральского, оказалась характерной столбчатая структура, тогда как после процедуры ИПД структура состояла из концентрических колец, которые содержали вытянутые наноразмерные кристаллиты. Структура магнитных доменов была визуализирована с помощью метода МСМ, который четко продемонстрировал связь между особенностями микроструктуры и конфигурацией магнитных доменов.

Ключевые слова: атомно-силовая и магнитно-силовая микроскопия, магнитотвердый материал, наноструктура, доменная структура

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проекты № 075-00715-22-00 и № 0784-2020-0025. И. А. Пелевин и И. С. Терёшина выполняли исследования при поддержке гранта Российского научного фонда № 21-79-10239.

Для цитирования: Терёшина И. С., Политова Г. А., Каминская Т. П., Попов В. В., Гундеров Д. В., Филимонов А. В., Пелевин И. А. Особенности формирования наноструктуры в сплавах системы Nd-Pr-Fe-B, исследованные методами атомно-

силовой и магнитно-силовой микроскопии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 34–45. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15204>

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.15204>

FEATURES OF THE NANOSTRUCTURE FORMATION IN THE Nd-Pr-Fe-B-SYSTEM ALLOYS: A STUDY BY AFM AND MFM

I. S. Tereshina ^{1, 5}, G. A. Politova ^{2, 4}✉, T. P. Kaminskaya ¹,
V. V. Popov ¹, D. V. Gunderov ³, A. V. Filimonov ⁴, I. A. Pelevin ⁵

¹ Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia;

² Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science, RAS, Moscow, Russia;

³ Institute of Molecule and Crystal Physics – subdivision of the Ufa
Federal Research Centre of the RAS, Ufa, Russia;

⁴ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

⁵ National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russia

✉ gpolitova@gmail.com

Abstract. In this work, polycrystalline samples of hard-magnetic materials of $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ general formula have been prepared and subjected to severe plastic deformation (SPD). Thereafter the features of nanostructure formation in the compounds were investigated before and after SPD using atomic force microscopy and magnetic force one (AFM & MFM). The differences in texture formation were revealed when studying the surface microstructure of both the initial and deformed samples. The initial ones prepared by the Czochralski method, exhibited the columnar structure, while the SPD samples exhibited the concentric rings containing elongated nanosized crystallites. The magnetic domain structure was visualized using the MFM that clearly demonstrated the relationship between the microstructural features and the magnetic domains' configuration.

Keywords: atomic force microscopy, magnetic force microscopy, hard-magnetic material, nanostructure

Funding: The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, projects No. 075-00715-22-00 and No. 0784-2020-0025. The research of I. A. Pelevin and I. S. Tereshina was funded by the Russian Science Foundation (Agreement No. 21-79-10239)

For citation. Tereshina I. S., Politova G. A., Kaminskaya T. P., Popov V. V., Gunderov D. V., Filimonov A. V., Pelevin I. A., Features of the nanostructure formation in the Nd-Pr-Fe-B-system alloys: a study by AFM and MFM, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 34–45. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15204>

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

Введение

Создание новых высокотехнологичных устройств, включая компьютеры, двигатели и генераторы, оборудования для магнитно-резонансной томографии и др. [1 – 3], вызывает большой спрос на высокоэнергетические магнитотвердые материалы, способные работать стабильно при различных температурах. Особое внимание уделяется материалам $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ [1 – 3]. Известно, что постоянные магниты на основе соединения $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ проявляют наилучшие свойства в узком диапазоне температур 150 – 400 К [4, 5]. Наибольшее, экспериментально полученное, энергетическое произведение составляет 475 кДж/м^3 (59,6 МГсЭ (мегаГаусс-Эрстед)) [5], что близко к предсказанному теоретическому пределу $(BH)_{\text{max}}$ для соединения $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Известно, что при $T = 135 \text{ К}$ тип магнитной анизотропии в соединении $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ меняется с «легкой оси» на «конус осей легкого намагничивания», другими словами, происходит спонтанный спин-переориентационный переход (СПП) при понижении температуры [6, 7]. Это приводит к уменьшению остаточной намагниченности и энергетического произведения, что ограничивает применимость материала на основе соединения $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ в области низких температур. Частичная замена атомов неодима атомами празеодима позволяет понизить температуру СПП и расширить рабочий температурный диапазон магнитов на основе полученных соединений системы $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Следует отметить, что уровень характеристик магнитов сильно зависит от особенностей микроструктуры. Например, известно, что магнитные свойства можно улучшить за счет формирования наноструктур [8, 9]. Сплавы с нанокристаллической структурой могут быть получены различными методами, и прежде всего, традиционными. К последним относятся порошковая металлургия [10, 11], ленточное литье [12, 13], интенсивная пластическая деформация [14 – 18] и другие методы, а также их комбинации [9, 14, 19 – 21]. Существуют и новые современные аддитивные методы производства высокоэффективных магнитных материалов, включая магнитотвердые [22 – 24]. Независимо от выбранного метода, механизмы формирования магнитных свойств и их корреляция со структурными особенностями во многом одинаковы.

Таким образом, методы структурного анализа наноструктурированных материалов можно применять для образцов, полученных любым из перечисленных выше методов, в том числе и современными передовыми; к ним можно отнести, в частности, селективное лазерное плавление (СЛП) материалов Nd-Fe-B [25 – 27]. Процесс СЛП характеризуется высокими скоростями охлаждения (10^6 К/с [28]) и быстрым затвердеванием, что может приводить к образованию наноструктур.

Следует отметить, что разработка современных высокоэнергетических постоянных магнитов на основе системы лантаноид-железо-бор – $R\text{-Fe-B}$ ($R = \text{Nd, Pr}$) возможна только при формировании оптимальной микроструктуры и текстуры, а также оптимального фазового состава и распределения редкоземельной фазы по границам зерен. Наличие в микроструктуре беспорядочно ориентированных или вытянутых зерен основной фазы, включений посторонних фаз (особенно магнитомягких, таких как $\alpha\text{-Fe}$), как правило, снижает конечные магнитные характеристики. Вот почему для качественного скачка в достижении новых результатов в системе Nd-Pr-Fe-B необходим глубокий анализ и понимание особенностей формирования микроструктуры.

Настоящая работа направлена на исследование особенностей формирования наноструктуры соединений $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ в процессе интенсивной пластической деформации (ИПД) методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии.

Работа выполняется как продолжение более ранних исследований [18, 29], развивающих методы и подходы к анализу наноструктурированных магнитных материалов. Эти подходы планируется применять в дальнейших исследованиях для образцов Nd-Pr-Fe-B , полученных, например, методом селективного лазерного плавления.

Методика измерений

Сплавы $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ($x = 0,50$ и $0,75$) были синтезированы с помощью модифицированного метода Чохральского в трехдуговой печи в инертной атмосфере [30]. В результате были получены поликристаллические образцы с направленной кристаллической структурой, а также монокристаллы небольших размеров. Именно поликристаллы использовались нами в данной работе для дальнейших исследований. Процедура интенсивной пла-



стической деформации проводилась на наковальнях Бриджмена путем кручения (число оборотов $n = 3$) под высоким давлением (6 ГПа), при комнатной температуре. Исследования образцов методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии проводились с использованием сканирующего зондового микроскопа SMENA-A, платформа “Solver” (NT-MDT, г. Зеленоград, Российская Федерация). Образцы исследовались в полуконтактном режиме при комнатной температуре с использованием стандартных кремниевых кантилеверов HA_NC ETALON с резонансными частотами от 110 до 235 кГц, с радиусом закругления кончика иглы 10 нм. Для МСМ-исследований были использованы кантилеверы MFM 01 с магнитным покрытием (Co) с частотами 50 – 85 кГц. Элементный анализ проводили с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) TESCAN Vega 3 (Tescan Analytics, Fuveau, Франция).

Результаты

Проведенные нами ранее исследования [30] показали, что сплавы $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ кристаллизуются в тетрагональной кристаллической симметрии (пространственная группа $P42/mnm$) типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Количество основной фазы в исходных сплавах колебалось от 86 до 98 %. В сплаве с $x = 0,75$ выявлено большое количество фазы альфа-железа (до 13 %). Методом СЭМ был определен элементный состав зерен. Так, содержание железа в основном зерне составляло около 70,41 мас. %, что соответствует фазе $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, а содержание железа на границах зерен было значительно (в 30 – 130 раз) ниже. Такие элементы, как Cu и Ni, присутствовали, главным образом, на границах зерен и рассматривались нами как примеси в пограничной области; кислород же присутствовал, в основном, во включениях. Так, небольшое количество кислорода, обнаруженное во включениях, богатых железом, свидетельствует о наличии оксидов в структуре сплавов.

На рис. 1 представлены изображения микроструктуры поверхности сплава $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ с $x = 0,5$ до и после ИПД. Эти образцы содержат минимальное количество второй фазы и представляют наибольший интерес для исследования. Столбчатая структура (рис. 1,а), связана с методом синтеза образцов. Этот метод обычно используется для выращивания крупных монокристаллов, однако в настоящей работе, как уже отмечалась выше, монокристаллическая структура не преобладала. Тем не менее, направленный тепловод, присущий этому методу, привел к формированию некоторой одноосной текстуры, которая может выглядеть как столбчатая структура. Столбцы имели ширину около 0,8 мкм и располагались преимущественно перпендикулярно исследуемой поверхности. Структура поверхности исходного образца состояла из слегка вытянутых субзерен (отношение сторон составляло около 1,5) размером порядка 100 – 200 нм. Именно высоким температурным градиентом (а значит, и высокими скоростями охлаждения и кристаллизации) можно объяснить образование столь мелких структурных элементов на поверхности исходного образца в процессе синтеза. Следует также отметить, что наблюдаемые включения, состоящие в основном из атомов железа, из-за более высокой температуры плавления должны кристаллизоваться в первую очередь. Таким образом, включения железа выступали в роли центров зарождения зерен основной фазы.

Микроструктура поверхности $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$ после процедуры ИПД существенно отличается от исходной, что хорошо видно на рис. 1,б. Обнаруживаются скопления кристаллитов в форме «закрученного вихря», в которых столбчатая структура все еще существует. Это лучше видно на рис. 1,с, где показан другой участок поверхности того же образца. Подобные особенности микроструктуры в сплавах типа $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, полученных по технологии стрип-кастинга (англ. strip casting), наблюдались в работе [31].

Для лучшей визуализации вихревой структуры в направлении, перпендикулярном поверхности, выявления ее формы и типичных размеров основных структурных элементов, образцы полировали и травили 5%-м раствором азотной кислоты в этиловом спирте. Изображения таких отполированных и протравленных поверхностей представлены на рис. 2. Видно, что закрученный вихрь состоит из концентрических колец толщиной 150 – 300 нм (в одном слое кристаллитов), плотно прилегающих друг к другу. Видны кристаллиты различных размеров и форм, ориентированные преимущественно по окружности вихря.

Возможными причинами такой закрученной вихревой структуры являются разные скорости деформации и неравномерный нагрев образца в разных его точках в процессе про-

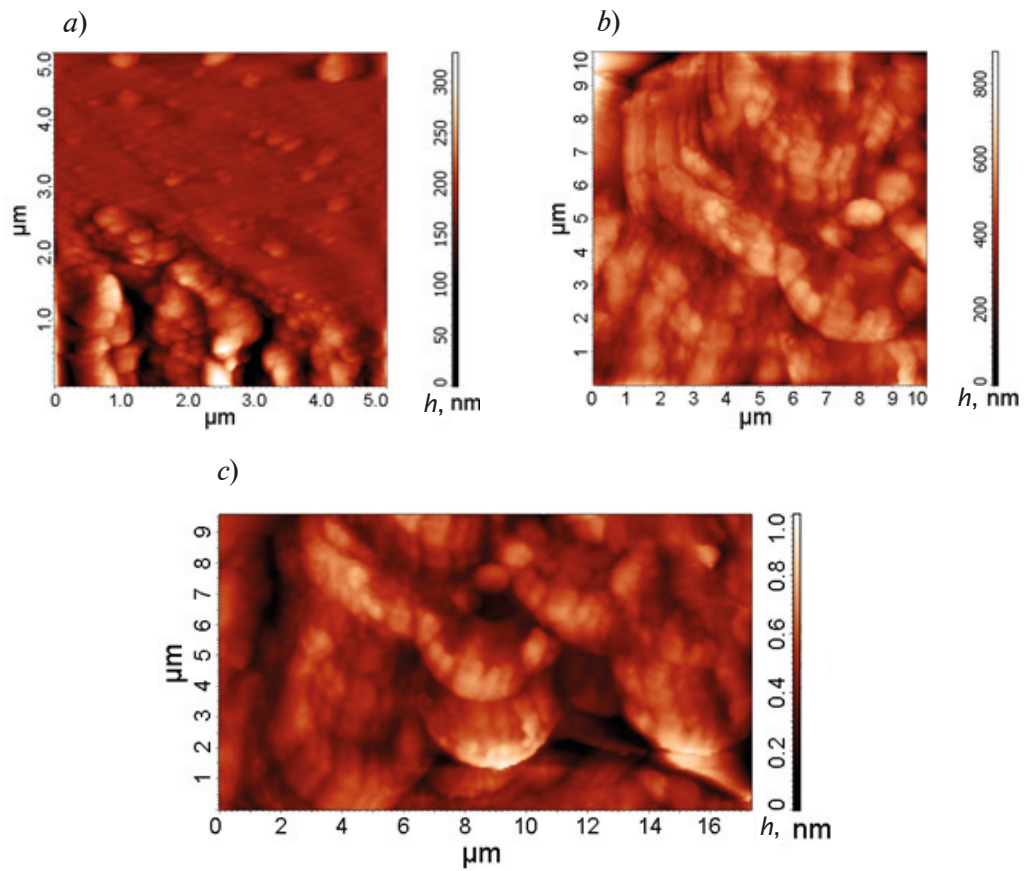


Рис. 1. АСМ-изображения микроструктуры поверхности сплава $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$ до (a) и после (b,c) интенсивной пластической деформации; c – другой участок поверхности образца (b), где лучше видны закрученные вихревые структуры

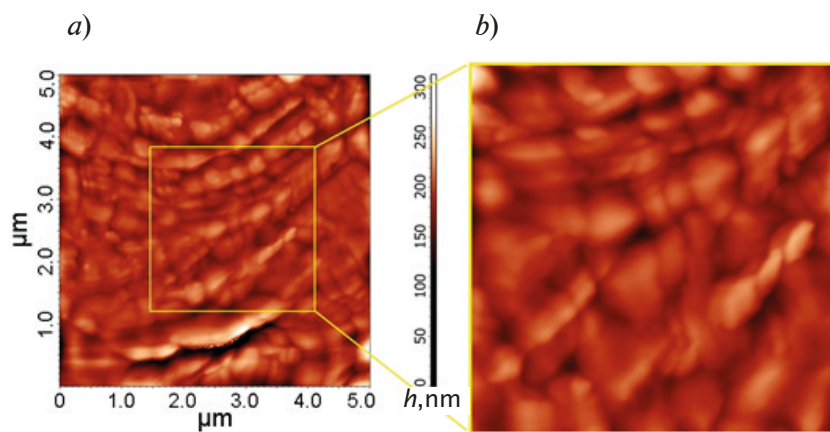


Рис. 2. АСМ-снимок образца $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$ после ИПД (см. рис. 1, c), полировки поверхности и травления кислотой (a), а также его фрагмент (b)



ведения процедуры ИПД. Наблюдаемые особенности микроструктуры, вследствие деформации, также можно рассматривать как округлую текстуру, индуцированную внешним воздействием.

Метод МСМ использовался нами для визуализации структуры магнитных доменов на поверхностях образцов. На рис. 3, чтобы показать разницу, связанную с деформацией, представлено МСМ-изображение поверхности сплава $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$ до и после процедуры ИПД. Видна двойная доменная структура, а именно: полосовые домены шириной 5 – 10 мкм на поверхности сплава до ИПД (рис. 3,*a*) и шириной 5 – 7 мкм для образца после ИПД (рис. 3,*b*), а также наложенная на эти полосы классическая однородная разветвленная доменная структура на поверхности сплава до ИПД с шириной доменов 1 – 3 мкм (рис. 3,*c*) и более сложная однородная структура на поверхности сплава после ИПД (рис. 3,*d*) с доменами шириной 1 – 2 мкм.

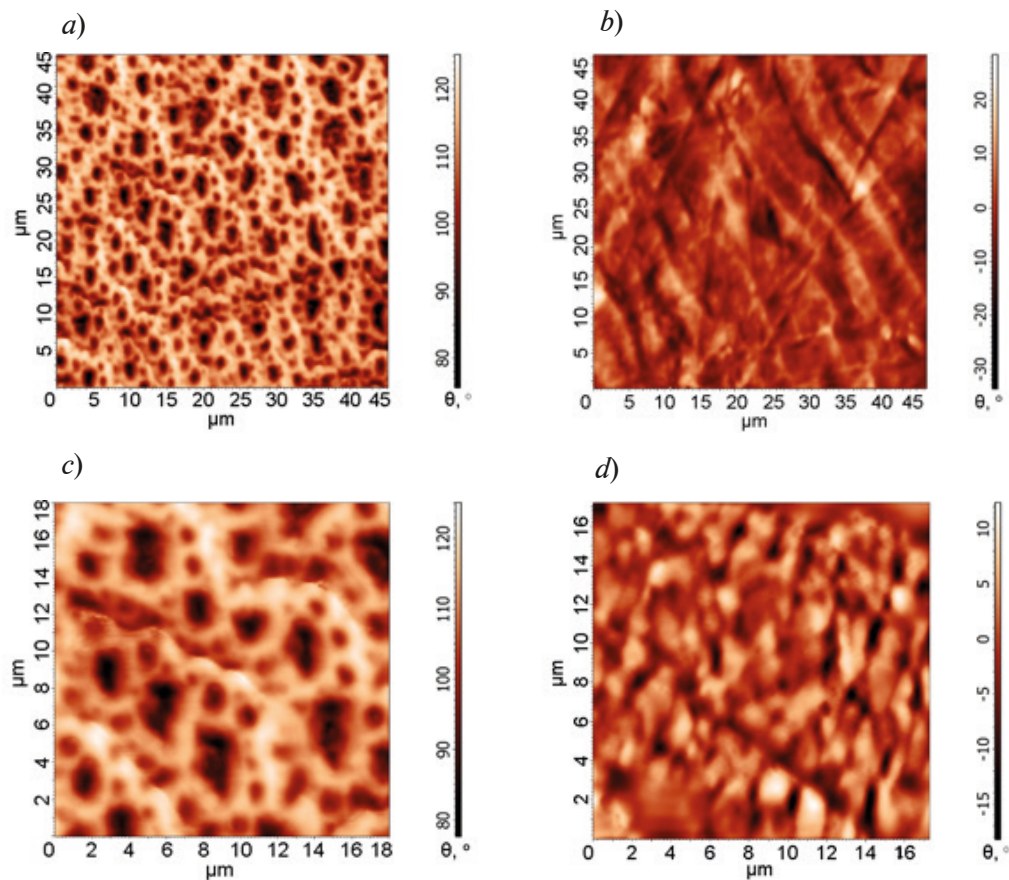


Fig. 3. МСМ-изображения двойной доменной структуры поверхности сплава $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$ до (*a,c*) и после (*b,d*) интенсивной пластической деформации; видны полосовые домены (*a, b*), а также классическая разветвленная (*c*) и более сложная (*d*) однородные структуры

Наблюдаемая сложная доменная структура образца после ИПД (рис. 3, *b* и *d*) могла возникнуть вследствие гораздо более неоднородной микроструктуры и возможного присутствия некоторого количества аморфной фазы. В работах [9, 14] показано существование аморфной фазы после процедуры ИПД, объемное содержание которой может превышать 50 %, что делает ее доминирующей фазой в структуре. Наблюдаемая «ямочная» доменная структура может свидетельствовать о том, что базисная плоскость большинства кристаллитов совпадала с поверхностью образца до того, как процедура ИПД способствовала изменению текстуры в образцах. В исходном образце наблюдаются в основном равноосные домены (темные области на рис. 3,*a*). Равномерно темная заливка округлых доменов означает однодоменное состояние соответствующих кристаллитов.

Анализ МСМ-изображений образцов после процедуры ИПД не дает такой же однозначно интерпретируемой доменной структуры, как в случае исходных образцов, что затрудняет описание формы кристаллитов, выявление посторонних фаз, включений и т. п. Однако вполне очевидно, что процедура ИПД нарушает текстуру исходных образцов и, главное, дезориентирует структурные элементы.

Заключение

Образцы типа $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ были синтезированы для изучения особенностей формирования морфологии их поверхности в исходном состоянии и после процедуры интенсивной пластической деформации. Основная фаза исходных образцов имела структуру тетрагональной симметрии типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ с некоторым количеством $\alpha\text{-Fe}$, что характерно для исследуемых материалов. Наименьшее содержание $\alpha\text{-Fe}$ (до 2 %) было обнаружено в сплаве $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$, в то время как в сплаве $\text{Nd}_{0,5}\text{Pr}_{1,5}\text{Fe}_{14}\text{B}$ количество второй фазы достигало 13 %. Столбчатая структура (состоящая в свою очередь из округлых зерен размером порядка 100 – 200 нм) была характерна для исходного образца $\text{Nd}_1\text{Pr}_1\text{Fe}_{14}\text{B}$. Напротив, для образцов после процедуры ИПД были обнаружены агломерации в форме «закрученного вихря» (наборы концентрических колец толщиной 150 – 300 нм, состоящих из вытянутых наноразмерных кристаллитов).

Проведение МСМ-исследования и визуализации доменной структуры, с одной стороны, подтвердили результаты АСМ-анализа микроструктуры, а с другой стороны, продемонстрировали основные особенности формирующейся структуры магнитных доменов. В то время как исходный образец имел классическую «ямочную» доменную структуру с монодоменными кристаллитами, образец после процедуры ИПД имел сложную «размытую» доменную структуру, что можно объяснить как особенностями микроструктуры, так и появлением аморфной фазы после интенсивной пластической деформации.

Проведенное исследование демонстрирует удобство и информативность использования методов АСМ и МСМ при изучении поверхности нанокристаллических магнитотвердых материалов, в частности, материалов $(\text{Nd,Pr})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, рассмотренных в данной работе, а также позволяет выявить основные особенности формирования их структуры до и после интенсивной пластической деформации. АСМ- и МСМ-исследования морфологии поверхности сплавов позволяют получать сведения о размерах всех основных структурных элементов и их форме на наноуровне, о доменной структуре, позволяют выявить различия в текстурообразовании, в зависимости от методов получения сплавов и их дальнейшей обработки, что чрезвычайно важно для производства высокоэффективных магнитотвердых материалов и изделий из них различного функционального назначения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hara T., Tanaka T., Kitamura H., Bizen T., Maréchal X., Seike T., Kohda T., Matsuura Y. Cryogenic permanent magnet undulators // *Physical Review. ST. Accelerators and Beams*. 2004. Vol. 7. No. 5. P. 050702.
2. Huang J. C., Kitamura H., Yang C. K., Chang C. H., Hwang C. S. Challenges of in-vacuum and cryogenic permanent magnet undulator technologies // *Physical Review. ST. Accelerators and Beams*. 2017. Vol. 20. No. 6. P. 064801.
3. Neznakhin D. S., Politova G. A., Ivanov L. A., Volegov A. S., Gorbunov D. I., Tereshina I. S., Kudrevatykh N. V. Low-temperature magnetic hysteresis in Nd(Pr)-Fe-B nanostructured alloys with $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ type main phase composition // *Defect and Diffusion Forum*. 2018. Vol. 386. Pp. 125–130.
4. Herbst J. F. $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ materials: Intrinsic properties and technological aspects // *Review of the Modern Physics*. 1991. Vol. 63. No. 4. Pp. 819–898.
5. Benabderrahmane C., Berteaud P., Valléau M., Kitegi C., Tavakoli K., Béchu N., Mary A., Filhol J. M., Couprie M. E. $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ and $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ magnets characterisation and modelling for cryogenic permanent magnet undulator applications // *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A*. 2012. Vol. 669. 21 March. Pp. 1–6.
6. Kim Y. B., Kim M. J., Han-Mina J., Kim T. K. Spin reorientation and magnetocrystalline anisotropy of $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1999. Vol. 191. No. 1–2. Pp. 133–136.



7. Politova G. A., Tereshina I. S., Gorbunov D. I., Paukov M. A., Andreev A. V., Grechishkin R. M., Rogacki K. Magnetic and magnetocaloric properties of single crystal $(\text{Nd}_{0.5}\text{Pr}_{0.5})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ // Journal of Alloys and Compounds. 2018. Vol. 751. 30 June. Pp. 283–288.
8. Lewis L. H., Panchanathan V., Wang J. Y. Technical magnetic properties of melt-spun $(\text{Nd}_{1-x}\text{Pr}_x)_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ at low temperature // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1997. Vol. 176. No. 2–3. Pp. 288–296.
9. Tereshina I. S., Pelevin I. A., Tereshina E. A., et al. Magnetic hysteresis properties of nanocrystalline $(\text{Nd,Ho})\text{-(Fe,Co)-B}$ alloy after melt spinning, severe plastic deformation and subsequent heat treatment // Journal of Alloys and Compounds. 2016. Vol. 681. 5 October. Pp. 555–560.
10. Gutfleisch O., Harris I. R. Fundamental and practical aspects of the hydrogenation, disproportionation, desorption and recombination process // Journal of Physics D. 1996. Vol. 29. No. 9. P. 2255–2265.
11. Gutfleisch O., Willard M. A., Brück E., Chen C. H., Sankar S. G., Liu J. P. Magnetic materials and devices for the 21st century: Stronger, lighter, and more energy efficient // Advanced Materials. 2011. Vol. 23. No. 7. Pp. 821–842.
12. Croat J. J. Manufacture of NdFeB permanent magnets by rapid solidification // Journal of the Less-Common Metals. 1989. Vol. 148. No. 1–2. Pp. 7–15.
13. Gabay A. M., Popov A. G., Gaviko V. S., Belozero V. V., Yermolenko A. S. The structure and magnetic properties of rapidly quenched and annealed multi-phase nanocrystalline $\text{Nd}_9\text{Fe}_{91-x}\text{B}_x$ ribbons // Journal of Alloys and Compounds. 1996. Vol. 245. No. 1–2. Pp. 119–124.
14. Straumal B. B., Kilmametov A. R., Mazilkin A. A., Protasova S. G., Kolesnikova K. I., Straumal P. B., Baretzky B. Amorphization of Nd-Fe-B alloy under the action of high-pressure torsion // Materials Letters. 2015. Vol. 145. 15 April. Pp. 63–66.
15. Li H., Li W., Zhang Y., Gunderov D. V., Zhang X. Phase evolution, microstructure and magnetic properties of bulk $\alpha\text{-Fe/Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ nanocomposite magnets prepared by severe plastic deformation and thermal annealing // Journal of Alloys and Compounds. 2015. Vol. 651. 15 December. Pp. 434–439.
16. Hosokawa A., Takagi K., Kuriwa T., Inoue Y., Ozaki K. Severe plastic deformation of Nd-Fe-B nanocomposite magnets at room temperature // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2019. Vol. 473. 1 March. Pp. 51–60.
17. Tereshina-Chitrova E. A., Korneeva Y. V., Ozherelkov D. Y., Doležal P., Tereshina I. S., Kaminskaya T. P., Gorbunov D. I., Dobatkin S. V., Minčrik P. Enhanced magnetocaloric effect in distilled terbium and emergence of novel properties after severe plastic deformation // Scripta Materialia. 2020. Vol. 187. October. Pp. 340–344.
18. Pelevin I. A., Ozherelkov D. Y., Kaminskaya T. P., Tereshina I. S. Surface morphology investigations of nanocrystalline $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ($\text{R} = \text{Y, Nd, Gd, Er}$) by atomic force microscopy // Materials Research Proceedings. 2022. Vol. 21. Pp. 81–87.
19. Yagodkin Y. D., Lileev A. S., Lyubina J. V., Shingarev E. N., Glebov V. A., Nefedov V. S. Structure and magnetic properties of nanocrystalline alloys based on $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ obtained by various techniques // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2003. Vol. 258–259. March. Pp. 586–589.
20. Dempsey N. M., Walther A., May F., Givord D., Khlopkov K., Gutfleisch O. High performance hard magnetic NdFeB thick films for integration into micro-electro-mechanical systems // Applied Physics Letters. 2007. Vol. 90. No. 9. P. 092509.
21. Политова Г. А., Терешина И. С., Каминская Т. П., Пауков М. А., Добаткин С. В. Исследование методом атомно-силовой микроскопии морфологии поверхности сплавов $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, полученных с помощью различных технологий // Металлы. 2018. № 5. С. 75–82.
22. Li L., Tirado A., Nlebedim I. C., et al. Big area additive manufacturing of high performance bonded NdFeB magnets // Scientific Reports. 2016. Vol. 6. P. 36212.
23. Paranthaman M. P., Shafer C. S., Elliott A. M., Siddel D. H., McGuire M. A., Springfield R. M., Martin J., Fredette R., Ormerod J. Binder jetting: A novel NdFeB bonded magnet fabrication process // Journal of Minerals, Metals and Materials. 2016. Vol. 68. No. 7. Pp. 1978–1982.
24. Li L., Post B., Kunc V., Elliott A. M., Paranthaman M. P. Additive manufacturing of near-net-shape bonded magnets: Prospects and challenges // Scripta Materialia. 2017. Vol. 135. 1 July. Pp. 100–104.
25. Bittner F., Thielsch J., Drossel W. G. Microstructure and magnetic properties of Nd-Fe-B permanent magnets produced by laser powder bed fusion // Scripta Materialia. 2021. Vol. 201. August.

P. 113921.

26. Jaćimović J., Binda F., Herrmann L. G., Greuter F., Genta J., Calvo M., Tomše T., Simon R. A. Net shape 3D printed NdFeB permanent magnet // *Advanced Engineering Materials*. 2017. Vol. 19. No. 8. P. 1700098.

27. Huber C., Sepehri-Amin H., Goertler M., Groenefeld M., Teliban I., Hono K., Suess D. Coercivity enhancement of selective laser sintered NdFeB magnets by grain boundary infiltration // *Acta Materialia*. 2019. Vol. 172. 15 June. Pp. 66–71.

28. Pelevin I. A., Nalivaiko A. Y., Ozherelkov D. Y., Shinkaryov A. S., Chernyshikhin S. V., Arnautov A. N., Zmanovsky S. V., Gromov A. A. Selective laser melting of Al-based matrix composites with Al₂O₃ reinforcement: Features and advantages // *Materials*. 2021. Vol. 14. No. 10. P. 2648.

29. Андреева Н. В., Филимонов А. В., Рудской А. И., Бурханов Г. С., Терёшина И. С., Политова Г. А., Пелевин И. А. Исследование наноструктурированных магнитотвердых материалов системы Nd-Нo-Fe-Co-B методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии // *Физика твердого тела*. 2016. Т. 58. № 9. С. 1798–1805.

30. Politova G. A., Tereshina I. S., Kaminskaya T. P., Viryus A. A., Paukov M. A., Lukin A. A., Andreev A. V. Substituted (Nd,Pr)₂Fe₁₄B alloys: Structural features and magnetic properties // *Journal of Physics. Conference Series*. 2019. Vol. 1236. P. 012016.

31. Kolchugina N. B., Lukin A. A., Kaminskaya T. P., et al. Morphological peculiarities of R-Fe-B (R = Nd, Pr) alloys formed upon solidification by strip-casting // *Physics of Metals and Metallography*. 2020. Vol. 121. No. 8. Pp. 772–782.

REFERENCES

1. Hara T., Tanaka T., Kitamura H., et al., Cryogenic permanent magnet undulators, *Phys. Rev. ST. Accel. Beams*. 7 (5) (2004) 050702.

2. Huang J. C., Kitamura H., Yang C. K., et al., Challenges of in-vacuum and cryogenic permanent magnet undulator technologies, *Phys. Rev. ST. Accel. Beams*. 20 (6) (2017) 064801.

3. Neznakhin D. S., Politova G. A., Ivanov L. A., et al., Low-temperature magnetic hysteresis in Nd(Pr)-Fe-B nanostructured alloys with Nd₂Fe₁₄B type main phase composition, *Defect Diffus. Forum*. 386 (2018) 125–130.

4. Herbst J. F., R₂Fe₁₄B materials: Intrinsic properties and technological aspects, *Rev. Mod. Phys.* 63 (4) (1991) 819–898.

5. Benabderrahmane C., Berteaud P., Valléau M., et al., Nd₂Fe₁₄B and Pr₂Fe₁₄B magnets characterisation and modelling for cryogenic permanent magnet undulator applications, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A*. 669 (21 March) (2012) 1–6.

6. Kim Y. B., Kim M. J., Han-Mina J., Kim T. K., Spin reorientation and magnetocrystalline anisotropy of (Nd_{1-x}Pr_x)₂Fe₁₄B, *J. Magn. Magn. Mater.* 191 (1–2) (1999) 133–136.

7. Politova G. A., Tereshina I. S., Gorbunov D. I., et al., Magnetic and magnetocaloric properties of single crystal (Nd_{0.5}Pr_{0.5})₂Fe₁₄B, *J. Alloys Compd.* 751 (30 June) (2018) 283–288.

8. Lewis L. H., Panchanathan V., Wang J. Y., Technical magnetic properties of melt-spun (Nd_{1-x}Pr_x)₂Fe₁₄B at low temperature, *J. Magn. Magn. Mater.* 176 (2–3) (1997) 288–296.

9. Tereshina I. S., Pelevin I. A., Tereshina E. A., et al., Magnetic hysteresis properties of nanocrystalline (Nd,Ho)-(Fe,Co)-B alloy after melt spinning, severe plastic deformation and subsequent heat treatment, *J. Alloys Compd.* 681 (5 October) (2016) 555–560.

10. Gutfleisch O., Harris I. R., Fundamental and practical aspects of the hydrogenation, disproportionation, desorption and recombination process, *J. Phys. D*. 29 (9) (1996) 2255–2265.

11. Gutfleisch O., Willard M. A., Brück E., et al., Magnetic materials and devices for the 21st century: Stronger, lighter, and more energy efficient, *Adv. Mater.* 23 (7) (2011) 821–842.

12. Croat J. J., Manufacture of NdFeB permanent magnets by rapid solidification, *J. Less-Common Met.* 148 (1–2) (1989) 7–15.

13. Gabay A. M., Popov A. G., Gaviko V. S., et al., The structure and magnetic properties of rapidly quenched and annealed multi-phase nanocrystalline Nd₂Fe_{91-x}B_x ribbons, *J. Alloys Compd.* 245 (1–2) (1996) 119–124.

14. Straumal B. B., Kilmametov A. R., Mazilkin A. A., et al., Amorphization of Nd-Fe-B alloy under the action of high-pressure torsion, *Mater. Lett.* 145 (15 April) (2015) 63–66.

15. Li H., Li W., Zhang Y., et al., Phase evolution, microstructure and magnetic properties of



bulk α -Fe/Nd₂Fe₁₄B nanocomposite magnets prepared by severe plastic deformation and thermal annealing, *J. Alloys Compd.* 651 (15 December) (2015) 434–439.

16. Hosokawa A., Takagi K., Kuriwa T., et al., Severe plastic deformation of Nd-Fe-B nanocomposite magnets at room temperature, *J. Magn. Magn. Mater.* 473 (1 March) (2019) Pp. 51–60.

17. Tereshina-Chitrova E. A., Korneeva Y. V., Ozherelkov D. Y., et al., Enhanced magnetocaloric effect in distilled terbium and emergence of novel properties after severe plastic deformation, *Scr. Mater.* 187 (October) (2020) 340–344.

18. Pelevin I. A., Ozherelkov D. Y., Kaminskaya T. P., Tereshina I. S., Surface morphology investigations of nanocrystalline R₂Fe₁₄B (R = Y, Nd, Gd, Er) by atomic force microscopy, *Mater. Res. Proc.* 21 (2022) 81–87.

19. Yagodkin Y. D., Lileev A. S., Lyubina J. V., et al., Structure and magnetic properties of nanocrystalline alloys based on Nd₂Fe₁₄B obtained by various techniques, *J. Magn. Magn. Mater.* 258–259 (March) (2003) 586–589.

20. Dempsey N. M., Walther A., May F., et al., High performance hard magnetic NdFeB thick films for integration into micro-electro-mechanical systems, *Appl. Phys. Lett.* 90 (9) (2007) 092509.

21. Politova G. A., Tereshina I. S., Kaminskaya T. P., et al., Atomic-force microscopic study of the surface morphology of the Nd₂Fe₁₄B alloys prepared by various techniques, *Russian Metallurgy (Metally)*. 2018 (9) (2018) 859–866.

22. Li L., Tirado A., Nlebedim I. C., et al., Big area additive manufacturing of high performance bonded NdFeB magnets, *Sci. Rep.* 6 (2016) 36212.

23. Paranthaman M. P., Shafer C. S., Elliott A. M., et al., Binder jetting: A novel NdFeB bonded magnet fabrication process, *J. Min. Met. Mater.* 68 (7) (2016) 1978–1982.

24. Li L., Post B., Kunc V., et al., Additive manufacturing of near-net-shape bonded magnets: Prospects and challenges, *Scr. Mater.* 135 (1 July) (2017) 100–104.

25. Bittner F., Thielsch J., Drossel W. G., Microstructure and magnetic properties of Nd-Fe-B permanent magnets produced by laser powder bed fusion, *Scr. Mater.* 201 (August) (2021) 113921.

26. Jaćimović J., Binda F., Herrmann L. G., et al., Net shape 3D printed NdFeB permanent magnet, *Adv. Eng. Mater.* 19 (8) (2017) 1700098.

27. Huber C., Sepehri-Amin H., Goertler M., et al., Coercivity enhancement of selective laser sintered NdFeB magnets by grain boundary infiltration, *Acta Mater.* 172 (15 June) (2019) 66–71.

28. Pelevin I. A., Nalivaiko A. Y., Ozherelkov D. Y., et al., Selective laser melting of Al-based matrix composites with Al₂O₃ reinforcement: Features and advantages, *Materials*. 14 (10) (2021) 2648.

29. Andreeva N. V., Filimonov A. V., Rudskoi A. I., et al., A study of nanostructure magnetosolid Nd-Ho-Fe-Co-B materials via atomic force microscopy and magnetic force microscopy, *Phys. Solid State*. 58 (9) (2016) 1862–1869.

30. Politova G. A., Tereshina I. S., Kaminskaya T. P., et al., Substituted (Nd,Pr)₂Fe₁₄B alloys: Structural features and magnetic properties, *J. Phys. Conf. Ser.* 1236 (2019) 012016.

31. Kolchugina N. B., Lukin A. A., Kaminskaya T. P., et al. Morphological peculiarities of R-Fe-B (R = Nd, Pr) alloys formed upon solidification by strip-casting, *Phys. Met. Metallogr.* 121 (8) (2020) 772–782.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТЕРЁШИНА Ирина Семеновна – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова; ведущий научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов (МИСиС)», г. Москва, Россия.

119991, Россия, г. Москва, ул. Ленинские Горы, 1

irina_tereshina@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3633-3440

ПОЛИТОВА Галина Александровна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук, г. Москва; старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия.

119334 Россия, г. Москва, Ленинский пр., 49
gpolitova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1908-9677

КАМИНСКАЯ Татьяна Петровна — кандидат технических наук, старший научный сотрудник кафедры общей физики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия.

119991, Россия, Москва, ул. Ленинские Горы, 1
ktp53@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3667-0837

ПОПОВ Владимир Викторович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры общей физики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия.

119991, Россия, Москва, ул. Ленинские Горы, 1
vpropov@physics.msu.ru
ORCID: 0000-0003-1191-3860

ГУНДЕРОВ Дмитрий Валерьевич — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов — обособленного структурного подразделения ФГБНУ — Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, Россия.

450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября, 151
dimagun@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5925-4513

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, соруководитель Научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

ПЕЛЕВИН Иван Алексеевич — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов (МИСиС)», г. Москва, Россия.

119049, Россия, г. Москва, Ленинский пр., 4
pele.po4ta@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1592-3062

THE AUTHORS

TERESHINA Irina S.

*Lomonosov Moscow State University,
National University of Science and Technology "MISiS"*
1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia
irina_tereshina@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3633-3440

POLITOVA Galina A.

*Baikov Institute of Metallurgy Materials Science, RAS, Moscow;
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg*
49, Leninskiy Ave., Moscow, 119334, Russia
gpolitova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1908-9677

KAMINSKAYA Tatiana P.*Lomonosov Moscow State University*

1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia

ktp53@mail.ru

ORCID: 0000-0002-3667-0837

POPOV Vladimir V.*Lomonosov Moscow State University*

1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia

vypopov@physics.msu.ru

ORCID: 0000-0003-1191-3860

GUNDEROV Dmitry V.*Institute of Molecule and Crystal Physic of the Ufa Federal Research Centre, RAS*

151, Oktyabr Ave., Ufa, 450075, Russia

dimagun@mail.ru

ORCID: 0000-0001-5925-4513

FILIMONOV Alexey V.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

filimonov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-2793-5717

PELEVIN Ivan A.*National University of Science and Technology "MISiS"*

4, Leninskiy Ave., Moscow, 119049, Russia

pele.po4ta@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-1592-3062

*Статья поступила в редакцию 19.04.2022. Одобрена после рецензирования 11.05.2022.
Принята 11.05.2022.*

Received 19.04.2022. Approved after reviewing 11.05.2022. Accepted 11.05.2022.

Биофизика и медицинская физика

Научная статья

УДК 577.359

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15205>

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ПЕРЕСТРОЕК ВНУТРИ ОДИНОЧНЫХ БАКТЕРИАЛЬНЫХ КЛЕТОК ПРИ ИНФЕКЦИИ БАКТЕРИОФАГОМ ϕ KZ С ПОМОЩЬЮ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ

**Д. А. Антонова, А. Д. Зотова, А. А. Усатых,
Н. Е. Морозова, М. В. Якунина** 

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

 yakuninam@nanobio.spbstu.ru

Аннотация. В работе проведена оценка ключевых свойств флуоресцентных белков (ФБ) с целью их использования при наблюдении процессов перераспределения целевых белков между цитоплазмой и псевдоядром, которое образуется в ходе инфицирования бактериальной клетки бактериофагом ϕ KZ. С помощью флуоресцентной микроскопии были изучены четыре ФБ: mNeonGreen, mCherry, ECFP и EYFP. Установлено, что белок EYFP, в отличие от остальных, локализуется в псевдоядре во время инфекции, что послужило основанием для его исключения из дальнейших опытов. В результате анализа полученных значений ключевых параметров ФБ был выявлен набор ФБ, перспективных для исследования процесса инфицирования бактериальных клеток.

Ключевые слова: флуоресцентный белок, оптическая микроскопия, бактериальная клетка, бактериофаг ϕ KZ

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 19-74-10030 от 15.08.2019).

Для цитирования: Антонова Д. А., Зотова А. Д., Усатых А. А., Морозова Н. Е., Якунина М. В. Характеризация флуоресцентных белков для изучения морфологических перестроек внутри одиночных бактериальных клеток при инфекции бактериофагом ϕ KZ с помощью оптической микроскопии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 46–55. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15205>

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.15205>

CHARACTERIZATION OF FLUORESCENT PROTEINS FOR STUDYING THE MORPHOLOGICAL REARRANGEMENTS INSIDE SINGLE BACTERIAL CELLS DURING INFECTION WITH ϕ KZ BACTERIOPHAGE

D. A. Antonova, A. D. Zotova, A. A. Usatykh,
N. E. Morozova, M. V. Yakunina 

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

 yakuninam@nanobio.spbstu.ru

Abstract. This work deals with evaluation of key properties of some fluorescent proteins (FPs) in order to use them for observation of redistributing the target proteins between the cytoplasm and pseudonucleus forming in bacterial cell infection by bacteriophage ϕ KZ. Four FPs, namely, mNeonGreen, mCherry, ECFP and EYFP, have been investigated using fluorescence microscopy. It was established that EYFP, unlike other objects, localized in the pseudonucleus during the infection. This phenomenon gave grounds to exclude EYFP from further experiments. As a result of analyzing the obtained values of FP key parameters, a set of FPs suitable for studying the process of bacterial cells infection by fluorescence microscopy was found.

Keywords: fluorescent protein, optical microscopy, bacterial cell, ϕ KZ bacteriophage

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Agreement No. 19-74-10030 dated August 15, 2019).

For citation: Antonova D. A., Zotova A. D., Usatykh A. A., Morozova N. E., Yakunina M. V., Characterization of fluorescent proteins for studying the morphological rearrangements inside single bacterial cells during infection with ϕ KZ bacteriophage, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 46–55. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15205>

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

Введение

Гигантские бактериофаги обладают большим кодирующим потенциалом их генома, и для большей части генов гомологичные последовательности среди других организмов на данный момент не обнаружены, поэтому сложно определить и их функции. Повышенный интерес к исследованию ϕ KZ-подобных бактериофагов вызван тем, что они в ходе инфекционного цикла формируют в центре клетки сферическую структуру, названную псевдоядром [1].

Псевдоядро покрыто белковой оболочкой, которая экранирует ДНК бактериофага от защитных систем инфицированной клетки, таких как системы рестрикции-модификации и CRISPR/Cas, которые направлены на разрушение чужеродных ДНК [2, 3]. Локализация псевдоядра обеспечивается благодаря наличию фагового аналога цитоскелета, образованного тубулиноподобным белком TubZ [1, 4]. Было показано [1], что во время развития инфекции псевдоядро отделяет от цитоплазмы клетки не только фаговую ДНК, но и аппарат транскрипции, в то время как механизмы трансляции протекают в цитоплазме. Была также обнаружена селективность транспорта ферментов в просвет псевдоядра: в опытах с фаговой невирионной РНК-полимеразой была подтверждена пост-трансляци-

онная транслокация через белковую стенку, что предполагает существование механизма избирательного транспорта [5, 6].

Таковыми же свойствами обладают ядра эукариотических клеток. В связи с этим можно предположить, что предшественники phiKZ-подобных вирусов, способных к формированию псевдоядер, могли сыграть ключевую роль в эволюционном происхождении ядра у современных эукариотических клеток [7].

Дальнейшее изучение процессов формирования фагового псевдоядра, механизмов транслокации белковых продуктов в его полость, механизмов селекции при транспорте и других процессов внутриклеточного развития бактериофага поможет провести больше параллелей с жизнедеятельностью эукариотической клетки, что позволит расширить понимание эволюционных путей возникновения многоклеточной жизни на Земле.

Объектом наших исследований служил фаг phiKZ, первый из описанных гигантских бактериофагов [8] (его геном имеет размер 280 т.п.н. (тысяч пар нуклеотидов)), и этот бактериофаг инфицирует бактерии вида *P. aeruginosa* [8]. Псевдоядро данного фага еще мало охарактеризовано, в отличие от родственного ему 201phi2-1 [5].

Одним из эффективных методов изучения бактериальной клетки является метод флуоресцентной микроскопии. Флуоресцентная визуализация позволяет установить, какие изменения происходят с клеткой во время инфицирования бактериофагом. В одном из исследований гигантских фагов путем слияния красного флуоресцентного белка (ФБ) mCherry с целевым белком было показано, что у бактериофага phiKZ белковая оболочка псевдоядра состоит в основном из белка Gr54 [1]. Это в значительной степени обусловило наш подход к исследованию белков бактериофага phiKZ во время развития инфекции в клетках. Однако также было показано, что мутированный вариант ФБ GFP – GFPmut1 – обнаруживает способность транслоцироваться в псевдоядро бактериофага phiKZ [3]. Это указало на необходимость проверки и подбора ФБ для дальнейших экспериментов.

В нашей работе мы провели отбор и проверили экспрессию нескольких генов ФБ в условиях инфекции клеток бактериофагом, чтобы выбрать среди них оптимальные для дальнейших исследований по развитию бактериофага phiKZ в клетках синегнойной палочки *P. aeruginosa*. В ходе подбора нам также удалось обнаружить еще один ФБ (EYFP), способный к транслокации через белковую оболочку псевдоядра.

Флуоресцентные методы

Флуоресцентные методы широко используются для изучения клеточных компартментов, белков и ДНК. В зависимости от объекта исследования, могут применяться различные способы флуоресцентного мечения. Для окраски частей клетки активно применяются органические низкомолекулярные красители. Так, для визуализации клеточных мембран используют липофильные красители Nile Red, для окраски мембран митохондрий – MitoRed, MitoTracker Red [9], а для локализации ДНК в клетке довольно часто применяют такие, как DAPI, Propidium Iodide, YOYO-1 и другие [1]. Некоторые красители обладают способностью окрашивать только мертвые клетки, что позволяет оценивать количество жизнеспособных бактерий в популяции. Однако набор специфичных красителей ограничен, и в большинстве случаев невозможно селективно окрасить какую-либо биомолекулу, вызывающую интерес.

Селективное флуоресцентное мечение часто осуществляется с помощью антител, которые обладают высокоспецифичным связыванием с мишенью. Антитела могут быть модифицированы молекулой флуорофора, что позволяет наблюдать за местоположением антитела (а значит и его мишени) в клетке с помощью флуоресцентной микроскопии [10]. Однако этот метод также имеет ограничения, например, возможность наблюдать мишень лишь в зафиксированных мертвых клетках, необходимость производства антител, специфичных к молекуле, вызывающей интерес (далее для краткости будет применяться формулировка «молекула интереса» или «белок интереса»), а также высокая стоимость модифицированных антител.

Для визуализации белковых структур, в том числе в живых клетках, широко используются ФБ. На данный момент существует большое разнообразие ФБ, имеющих различные спектры возбуждения и испускания, различающиеся яркостью, временем созревания, чувствительностью к рН и т. п. Это позволяет исследователям выбирать белки, наиболее

подходящие для каждого конкретного эксперимента. Для создания белков слияния, гены ФБ встраивают в одну рамку считывания с генами белков интереса. В результате экспрессии такого гена получается белковая макромолекула, содержащая и белок интереса, и ФБ. Это позволяет детектировать местоположение флуоресцентного белка, а, следовательно, и белка интереса, с помощью флуоресцентной микроскопии живых клеток в течение длительного времени. Однако при использовании белков слияния необходимо убедиться, что ФБ принимает в клетке правильную конформацию и не мешает белку интереса выполнять свою функцию. Возможность наблюдения белка интереса внутри живой клетки в течение длительного времени служит наиболее важным критерием для дальнейших экспериментов, поэтому мы остановили свой выбор на мечении белков интереса с помощью ФБ.

Выбор флуоресцентных белков

Для наблюдения за синтезом и локализацией белков в режиме реального времени и в течение длительного периода, нам необходимо было выбрать оптимальные по своим характеристикам ФБ, которые в дальнейшем были бы удобны для одновременного наблюдения нескольких белков в одной клетке.

Мы рассмотрели следующие ФБ: ECFP, EGFP, mNeonGreen, EYFP, TagRFP, mCherry и FusionRed (табл. 1); данные были взяты из базы данных флуоресцентных белков FPbase [11].

Наиболее важными характеристиками ФБ явились в нашем исследовании время созревания белка *in vivo*, яркость свечения и стабильность.

По яркости, вычисляемой как произведение коэффициента молярной экстинкции на квантовый выход флуоресценции, самыми интенсивными оказались ФБ mNeonGreen, EYFP и TagRFP. Однако красный флуоресцентный белок TagRFP сильно уступал другим по времени созревания, которое также служит важной характеристикой, так как избыточно длительное культивирование бактериальной культуры может повлиять на результаты исследования, исказив их. По этому параметру также не подошел другой

Таблица 1

Ключевые характеристики ряда флуоресцентных белков

Параметр	Значение параметра для флуоресцентного белка						
	ECFP	EGFP	mNG	EYFP	TagRFP	mCherry	FR
Максимум возбуждения, нм	434	488	506	513	555	587	580
Максимум испускания, нм	477	507	517	527	584	610	608
ЕС, М ⁻¹ ·см ⁻¹	32,5	55,9	116	67,0	100	72	94,5
QY	0,40	0,60	0,80	0,67	0,48	0,22	0,19
Расчетная яркость	13,00	33,54	92,80	44,89	48,00	15,84	17,95
pKa	4,7	6,0	5,7	6,9	3,8	4,5	4,6
Время созревания, мин	–	60	10	9	100	15	130
Структура <i>in vivo</i>	М	WD	М	WD	WD	М	М

Обозначения: ЕС – коэффициент молярной экстинкции при максимуме поглощения; QY – квантовый выход флуоресценции; pKa – значение pH, при котором интенсивность флуоресценции падает до 50 % от максимального значения; М – мономер; WD – слабая димеризация.

Примечание. Яркость рассчитана как произведение ЕС × QY.

красный белок – FusionRed, несмотря на его высокую рН-стабильность. Таким образом, из красных белков, достаточно стабильным и с быстрым созреванием, оказался белок mCherry, хотя он и уступает TagRFP по яркости.

Белки mNeonGreen и EYFP превосходят белок EGFP по яркости свечения, а также обладают малыми временами созревания, по сравнению с ним, поэтому зеленый белок EGFP мы исключили из анализа. Несмотря на слабую рН-стабильность (высокое рКа) желтого белка EYFP, было решено его протестировать ввиду приемлемого уровня остальных его параметров. Белок ECFP является стабильным мономером, однако он обладает довольно слабой яркостью свечения, поэтому для дальнейших экспериментов его не рассматривали.

Исходя из приведенной выше аргументации мы выбрали для тестирования только три ФБ из списка: mNeonGreen, EYFP и mCherry. Для последующей экспрессии в клетках были сконструированы генные конструкции, содержащие гены этих ФБ.

Методика эксперимента

Флуоресцентная микроскопия позволяет визуализировать местоположение ФБ в клетках. Однако небольшое количество ФБ может затруднить последующую обработку изображений и анализ локализации белка в клетке. В текущих экспериментах, для улучшения качества изображений, клетки с вышеупомянутыми генными конструкциями растили в присутствии индуктора в среде, который активирует синтез белка в клетке. Таким образом, к началу эксперимента клетки уже содержали некоторое количество ФБ. Клетки инфицировали бактериофагом, немедленно помещали на предметное стекло с агарозной подложкой, содержащей индуктор и питательную среду, и накрывали покровным стеклом. В качестве контрольных использовали неинфицированные клетки. Препарат помещали под микроскоп для последующей съемки. Для флуоресцентной микроскопии использовали инвертированный микроскоп Nikon Eclipse Ti-E (Япония), оборудованный инкубатором, с использованием канала проходящего света, а также красного и желто-зеленого флуоресцентного канала. Для детекции красной флуоресценции использовался набор полосовых фильтров TxRed-4040C, для детекции желтой или зеленой флуоресценции – YFP-2427B (в обоих случаях фильтры компании Semrock, США). Во избежание обесцвечивания ФБ в клетках, во время съемки использовали фильтр ND8 (фирмы Fujifimi, Япония). Экспозиция была одинакова для всех белков и подбиралась таким образом, чтобы сигнал от ФБ не был слишком сильным во избежание зашкаливания. Съемка проводилась с частотой 1 раз в 10 мин в течение 3 ч при температуре 37 °С с помощью пользовательского скрипта в MicroManager.

Результаты и их обработка

Обработка полученных изображений проводилась с помощью программы ImageJ. Первоначально из них вычитали фон, затем в клетках измеряли относительную интенсивность свечения в клетке вне псевдоядра (I_0) и внутри него (I_1) для каждого тестируемого ФБ. Положение псевдоядра в клетках подтверждали с помощью окраски ДНК клеток флуоресцентным красителем DAPI (фирмы Beckman Counter Life Sciences, США). Поскольку абсолютное количество ФБ индивидуально для каждой клетки, была подсчитана его относительная величина в виде отношения I_1/I_0 в одной и той же инфицированной клетке. Затем для этого отношения находили среднее значение и среднеквадратичное отклонение среди рассматриваемых инфицированных клеток. Результаты расчетов сведены в табл. 2.

Следует отметить, что в неинфицированных клетках ФБ был распределен равномерно, в то время как поведение белка в клетке в процессе инфицирования было разным и зависело от типа белка (рис. 1). Флуоресцентный белок EYFP в ходе инфекции перераспределялся в псевдоядро, и средняя интенсивность свечения внутри него в клетке была вдвое выше, чем вне псевдоядра. Было признано, что такое поведение белка EYFP ограничивает его применение в дальнейших исследованиях. В то же время белки mNeonGreen и mCherry не входили в псевдоядро, так как интенсивность свечения внутри него в сходных условиях снизилась в среднем на 20 – 35 % (в зависимости от типа белка).

Немаловажным параметром для анализа данных флуоресцентной микроскопии служит также яркость белков в клетках. Чем выше интенсивность свечения белка, тем легче

Таблица 2

Результаты количественных расчетов содержания выбранных флуоресцентных белков в инфицированных клетках

Флуоресцентный белок	Количество рассматриваемых клеток	Среднее значение I_1/I_0	Среднеквадратичное отклонение
EYFP	45	2,10	0,50
mNeonGreen	37	0,80	0,11
mCherry	50	0,66	0,14

Обозначение: I_1/I_0 – отношение относительных интенсивностей свечения флуоресценции в клетке внутри псевдоядра (I_1) и вне его (I_0).

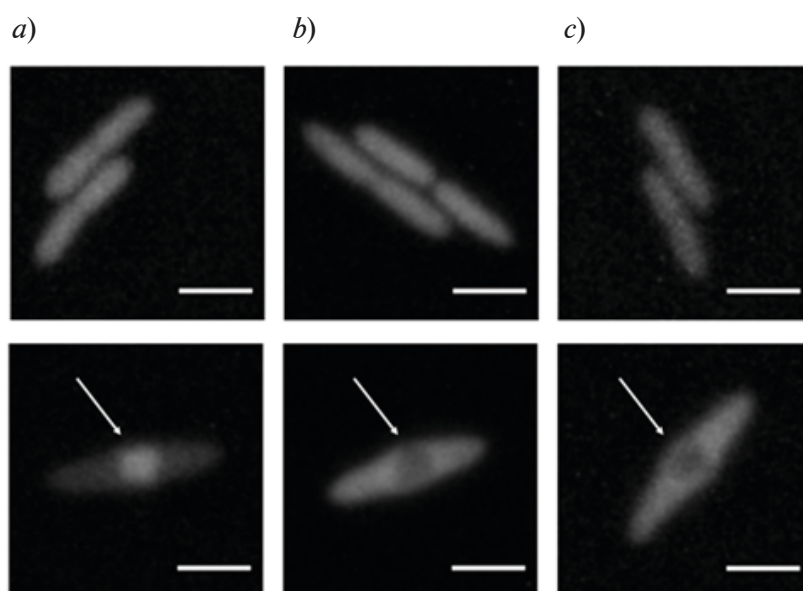


Рис. 1. Микрофотографии препаратов неинфицированных (верхний ряд) и инфицированных (нижний ряд) клеток, содержащих флуоресцентные белки EYFP (a), mNeonGreen (b) и mCherry (c) через 60 мин после начала инфицирования. Белые стрелки указывают на псевдоядра.

Длина масштабных отрезков – 2 мкм

обрабатывать и анализировать полученные изображения. Для каждого типа ФБ была подсчитана средняя интенсивность свечения по 80 неинфицированным клеткам, а также соответствующее среднеквадратичное отклонение на первом кадре съемки. Результаты этих расчетов следующие (в относительных единицах):

Флуоресцентный белок	Средняя интенсивность свечения, отн. ед.
mNeonGreen	550 ± 390 ,
mCherry	210 ± 110 ,
EYFP	250 ± 100 .

Представленные результаты наглядно показывают, что белок mNeonGreen лучше всех отвечает требованиям для дальнейших экспериментов, поскольку он не только не перераспределяется в псевдоядро, но и проявляет самую высокую яркость из рассматриваемых. Хотя средняя интенсивность свечения белка EYFP и была несколько выше, чем у

mCherry, но белок EYFP, в отличие от него, перераспределялся в псевдоядро, поэтому был отбракован. Обесцвечивание белка в данном эксперименте не налагает существенного ограничения, поскольку частота съемки была довольно низкой (1 раз в 10 мин) и новый ФБ успевал синтезироваться за временной интервал между кадрами съемки.

Оценка связи между аминокислотными последовательностями ФБ и их локализациями внутри клеток, инфицированных бактериофагом

В отличие от других вариантов изначального белка GFP (а именно, sfGFP и pMutinGFP), белок GFPmut1, перераспределяющийся в псевдоядро, содержит аминокислотные замены в позициях 99, 153 и 163. В положении 99 серин заменен на фенилаланин (99F), в 153 – тирозин на метионин (153M), в 163 – аланин на валин (163V), и наибольшее влияние на перераспределение в псевдоядро было отведено 99-фенилаланину и 153-метионину. ФБ EYFP, GFPmut1, а также ECFP, являются производными одного белка. Белок ECFP, как указано в статье [3], не перераспределяется в псевдоядро, в отличие от двух других. С целью проверки этого результата мы создали экспрессионную плазмиду, содержащую ген ECFP, и проанализировали его локализацию в условиях нашего эксперимента. Согласно полученным нами данным, белок ECFP действительно не входит в псевдоядро (рис. 2). Мы также проанализировали его аминокислотную последовательность и выровняли его с белками EYFP и GFPmut1 (рис. 3).

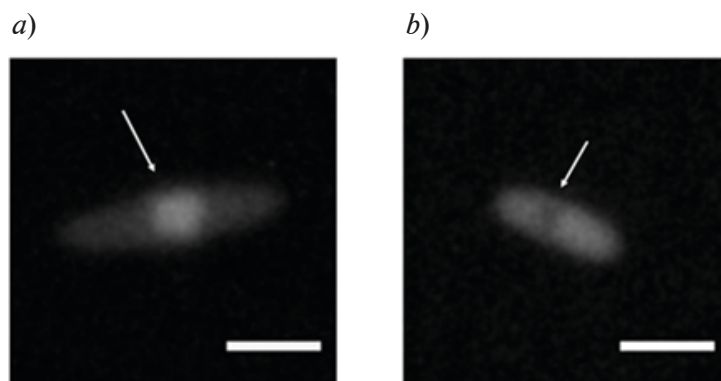


Рис. 2. Сравнение микрофотографий препаратов инфицированных клеток, содержащих флуоресцентные белки EYFP (a) и ECFP (b). Белые стрелки указывают на псевдоядра. Длина масштабных отрезков – 2 мкм

EYFP	MVSKGEELFTGVVPIVLVDGDVNGHKFSVSGEGEGDATYGKLT LKFICTTGKLPVPWPT	60
ECFP	MVSKGEELFTGVVPIVLVDGDVNGHKFSVSGEGEGDATYGKLT LKFICTTGKLPVPWPT	60
GFPmut1	-MSKGEELFTGVVPIVLVDGDVNGHKFSVSGEGEGDATYGKLT LKFICTTGKLPVPWPT	59
	:*****	
EYFP	LVTTFGYGLQCFARYPDHFKQHDFFKSAMPEGYVQERTIFFKDDGNYKTRAEVKFEGDTL	120
ECFP	LVTTLTWGVQCFSRYPDHFKQHDFFKSAMPEGYVQERTIFFKDDGNYKTRAEVKFEGDTL	120
GFPmut1	LVTTLTYGVCFSRYPDHFKQHDFFKSAMPEGYVQERTIFFKDDGNYKTRAEVKFEGDTL	119
	****: :*:*****	
	99	
EYFP	VNRIELKGIDFKEDGNILGHKLEYNYNHNVYIADKQKNGIKVNFKIRHNIEDGSVQLA	180
ECFP	VNRIELKGIDFKEDGNILGHKLEYNYNHNVYIADKQKNGIKVNFKIRHNIEDGSVQLA	180
GFPmut1	VNRIELKGIDFKEDGNILGHKLEYNYNHNVYIADKQKNGIKVNFKIRHNIEDGSVQLA	179

	153 163	
EYFP	DHYQQNTPIGGQPVLLPDNHYLSTQSALS KDPNEKRDMIVLLEFVTAAGITLGM'DELYK	239
ECFP	DHYQQNTPIGGQPVLLPDNHYLSTQSALS KDPNEKRDMIVLLEFVTAAGITLGM'DELYK	239
GFPmut1	DHYQQNTPIGGQPVLLPDNHYLSTQSALS KDPNEKRDMIVLLEFVTAAGITLGM'DELYK	238

Рис. 3. Выравнивание последовательностей аминокислот родственных флуоресцентных белков EYFP, ECFP и GFPmut1. Подчеркнуты и отмечены аминокислоты 99, 153 и 163 белка GFPmut1. В положении 99 у всех трех типов находится фенилаланин (F)



Как видно на рис. 3, белок EYFP содержит в своей последовательности обе аминокислоты, которые (по утверждению авторов предыдущего исследования) обеспечивают перераспределение ФБ внутрь псевдоядра, так что наши результаты, казалось бы, согласуются с указанным утверждением авторов. Однако белок ECFP, который в положении 99 также содержит фенилаланин, не перераспределяется внутрь псевдоядра, оставаясь в цитоплазме. В положение 153 белок ECFP несет ту же аминокислоту, что белки EYFP и EGFP.

Таким образом, полученные нами данные позволяют предположить, что механизм распределения ФБ между псевдоядром и цитоплазмой не зависит от наличия тех или иных аминокислот в определенных положениях, а связан, скорее всего, с общими изменениями структуры, которые ими вызываются.

Заключение

Проведенное исследование преследовало цель поиска флуоресцентных белков (ФБ), пригодных для мониторинга процессов их перераспределения между цитоплазмой и псевдоядром, образующимся в ходе инфицирования бактериальной клетки бактериофагом phiKZ.

В связи с указанной целью был проведен выбор ФБ для экспериментов по съемке живых клеток. Отобранные ФБ были протестированы по уровню яркости, и на этой основе изучено распределение ФБ в инфицированных клетках. Эксперименты показали, что белки ECFP, mNeonGreen и mCherry не поступают в псевдоядро, тогда как белок EYFP перераспределяется в псевдоядро в процессе инфицирования и по этой причине не подходит для дальнейших опытов. Помимо этого, дальнейшие эксперименты позволили опровергнуть традиционную теорию о связи конкретных мутаций во флуоресцентных белках с их положением относительно псевдоядра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chaikerasitak V., Nguyen K., Egan M. E., Erb M. L., Vavilina A., Pogliano J. The phage nucleus and tubulin spindle are conserved among large *Pseudomonas* phages // Cell Reports. 2017. Vol. 20. No. 7. Pp. 1563–1571.
2. Danilova Ya. A., Belousova V. V., Moiseenko A. V., Vishnyakov I. E., Yakunina M. V., Sokolova O. S. Maturation of pseudo-nucleus compartment in *P. aeruginosa*, infected with giant phiKZ phage // Viruses. 2020. Vol. 12. No. 10. P. 1197.
3. Nguyen K. T., Sugie J., Khanna K., Egan M. E., Birkholz E. A., Lee J., Beierschmitt C., Villa E., Pogliano J. Selective transport of fluorescent proteins into the phage nucleus // PloS ONE. 2021. Vol. 16. No. 6. P. e0251429.
4. Chaikerasitak V., Birkholz E. A., Pogliano J. The phage nucleus and PhuZ spindle: Defining features of the subcellular organization and speciation of nucleus-forming jumbo phages // Frontiers in Microbiology. 2021. 13 July. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2021.641317>.
5. Chaikerasitak V., Nguyen K. T., Khanna K., et al., Assembly of a nucleus-like structure during viral replication in bacteria // Science. 2017. Vol. 355. No. 6321. Pp. 194–197.
6. Ceysens P.-J., Minakhin L., den Bossche A. V., et al. Development of giant bacteriophage phiKZ is independent of the host transcription apparatus // Journal of Virology. 2014. Vol. 88. No. 18. Pp. 10501–10510.
7. Bell P. J. L. Evidence supporting a viral origin of the eukaryotic nucleus, Virus Research. 2020. Vol. 289. November. P. 198168.
8. Krylov V., Bourkaltseva M., Pleteneva E., Shaburova O., Krylov S., Karaulov A., Zhavoronok S., Svitich O., Zverev V. Phage phiKZ – The first of giants // Viruses. 2021. Vol. 13. No. 2. P. 149.
9. Shibata T., Yamashita S., Hirusaki K., Katoh K., Ohta Y. Isolation of mitochondria by gentle cell membrane disruption, and their subsequent characterization // Biochemical and Biophysical Research Communications. 2015. Vol. 463. No. 4. Pp. 563–568.
10. Oakeley E. J., Podesta A., Jost J.-P. Developmental changes in DNA methylation of the two tobacco pollen nuclei during maturation // Proceedings of the National Academy of Sciences. 1997. Vol. 94. No. 21. Pp. 11721–11725.
11. Lambert T. J. FPbase: a community-editable fluorescent protein database // Nature Methods. 2019. Vol. 16. No. 4. Pp. 277–278.

REFERENCES

1. Chaikerasak V., Nguyen K., Egan M. E., et al., The phage nucleus and tubulin spindle are conserved among large *Pseudomonas* phages, *Cell Rep.* 20 (7) (2017) 1563–1571.
2. Danilova Ya. A., Belousova V. V., Moiseenko A. V., et al., Maturation of pseudo-nucleus compartment in *P. aeruginosa*, infected with giant phiKZ phage, *Viruses.* 12 (10) (2020) 1197.
3. Nguyen K. T., Sugie J., Khanna K., et al., Selective transport of fluorescent proteins into the phage nucleus, *PLoS ONE.* 16 (6) (2021) e0251429.
4. Chaikerasak V., Birkholz E. A., Pogliano J., The phage nucleus and PhuZ spindle: Defining features of the subcellular organization and speciation of nucleus-forming jumbo phages, *Front. Microbiol.* 2021. 13 July, <https://doi.org/10.3389/fmicb.2021.641317>.
5. Chaikerasak V., Nguyen K. T., Khanna K., et al., Assembly of a nucleus-like structure during viral replication in bacteria, *Science.* 355 (6321) (2017) 194–197.
6. Ceysens P.-J., Minakhin L., den Bossche A. V., et al., Development of giant bacteriophage phiKZ is independent of the host transcription apparatus, *J. Virol.* 88 (18) (2014) 10501–10510.
7. Bell P. J. L., Evidence supporting a viral origin of the eukaryotic nucleus, *Virus Research.* 289 (November) (2020) 198168.
8. Krylov V., Bourkaltseva M., Pleteneva E., et al., Phage phiKZ – The first of giants, *Viruses.* 13 (2) (2021) 149.
9. Shibata T., Yamashita S., Hirusaki K., et al., Isolation of mitochondria by gentle cell membrane disruption, and their subsequent characterization, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 463 (4) (2015) 563–568.
10. Oakeley E. J., Podesta A., Jost J.-P., Developmental changes in DNA methylation of the two tobacco pollen nuclei during maturation, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 94 (21) (1997) 11721–11725.
11. Lambert T. J., FPbase: a community-editable fluorescent protein database, *Nat. Methods.* 16 (4) (2019) 277–278.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНТОНОВА Дарья Александровна – стажер-исследователь Лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nasada12@mail.ru
ORCID: 0000-0002-2611-081X

ЗОТОВА Анастасия Дмитриевна – лаборант-исследователь Лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
avotozana@gmail.com
ORCID: 0000-0002-0152-3220

УСАТЫХ Андрей Алексеевич – студент Института биомедицинских систем и биотехнологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
andrew.usatih@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-5377-3934

МОРОЗОВА Наталия Евгеньевна – 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
natusmorozovna@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3001-2593

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@nanobio.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2083-3643

THE AUTHORS

ANTONOVA Daria A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
nasada12@mail.ru
ORCID: 0000-0002-2611-081X

ZOTOVA Anastasia D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
avotozana@gmail.com
ORCID: 0000-0002-0152-3220

USATYKH Andrey A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
andrew.usatih@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-5377-3934

MOROZOVA Natalia E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
natusmorozovna@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3001-2593

YAKUNINA Maria V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
yakuninam@nanobio.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2083-3643

Статья поступила в редакцию 27.04.2022. Одобрена после рецензирования 28.04.2022. Принята 28.04.2022.

Received 27.04.2022. Approved after reviewing 28.04.2022. Accepted 28.04.2022.

Ядерная физика

Научная статья

УДК 539.1.03

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15206>

ОСОБЕННОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗОТОПА МЕДИ-64 НА ЦИКЛОТРОНЕ МГЦ-20 САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**А. Тиба [✉], П. А. Карасев, Я. А. Бердников,
А. Ю. Егоров, С. Ю. Миронова**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
[✉] alitiba1991@gmail.com

Аннотация. В статье рассматривается технология получения изотопа ^{64}Cu путем циклотронного облучения протонами никелевой фольги природного изотопного состава. С целью наработки изотопа ^{64}Cu , три образца тонкой никелевой фольги в виде дисков были облучены протонами с энергией 13 МэВ (ток пучка – 4 мкА) на циклотроне МГЦ-20 СПбПУ в течение трех часов. По окончании облучения эти образцы подвергали многоэтапной радиохимической обработке, направленной на получение химической формы, удобной для измерения активности примесей и изотопа ^{64}Cu , образованных в результате облучения. По данным гамма-спектрометрического анализа значение активности этого изотопа составило 30 МБк. Сравнение данных эксперимента с результатами выполненных расчетов наведенной активности изотопа ^{64}Cu , базирующихся на исходных данных и учитывающих условия эксперимента, показало хорошее согласие между ними.

Ключевые слова: изотоп меди-64, циклотронное облучение, природные никелевые фольги, сравнение.

Для цитирования: Тиба А., Карасев П. А., Бердников Я. А., Егоров А. Ю., Миронова С. Ю. Особенности получения изотопа меди-64 на циклотроне МГЦ-20 Санкт-Петербургского политехнического университета // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 56–63 DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15206>

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.15206>

FEATURES OF THE COPPER-64 ISOTOPE PRODUCTION USING THE MGC-20 CYCLOTRON AT ST. PETERSBURG POLYTECHNICAL UNIVERSITY

**A. Tiba [✉], P. A. Karasev, Ya. A. Berdnikov,
A. Yu. Egorov, S. Yu. Mironova**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
[✉] alitiba1991@gmail.com

Abstract. The article deals with the technology of ^{64}Cu isotope production by cyclotron proton irradiation of nickel foil of natural isotopic composition. In order to produce the ^{64}Cu isotope, three nickel samples were irradiated with 13 MeV protons (beam current was 4 μA) for three hours using the MGC-20 cyclotron at SPbPU. After irradiation the samples were subjected to multistage radiochemical treatment aimed at refining the chemical form suitable for measuring the activities of ^{64}Cu isotope and impurities. According to gamma spectrometric analysis, the ^{64}Cu activity value was 30 MBq. The performed calculations of induced ^{64}Cu isotope activity were based on the initial data and took into account the experimental conditions. A comparison of the experimental data with calculation results showed a good agreement between them.

Keywords: copper-64 isotope, cyclotron irradiation, natural nickel foil, comparison

For citation: Tiba A., Karaseov P. A., Berdnikov Ya. A., Egorov A. Yu., Mironova S. Yu., Features of the copper-64 isotope production using the MGC-20 cyclotron at St. Petersburg Polytechnical University, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 56–63 DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15206>

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

Введение

Молекулярная визуализация стала важным инструментом в лечении ряда заболеваний, в том числе раковых. Она не только обеспечивает возможности для неинвазивной визуализации физиологических процессов в живых организмах на клеточном и молекулярном уровнях, но также дает полезную информацию для раннего выявления и определения стадии заболевания, понимания его биологии, а также для оценки терапевтической эффективности. В настоящее время различные методы визуализации, такие как однофотонная эмиссионная компьютерная томография (ОФЭКТ) и позитронная эмиссионная томография (ПЭТ), используются для оценки конкретных молекулярных мишеней в биомедицинских и клинических областях. Среди различных методов молекулярной визуализации, ПЭТ-визуализация особенно быстро развивалась в течение последнего десятилетия. Это обусловлено тем, что технология ПЭТ в сочетании с использованием радиофармацевтических препаратов, излучающих позитроны, предоставляет возможности визуализации живых систем с высокой пространственной чувствительностью измерения и точной количественной оценкой [1].

Выбор радиоизотопа для разработки ПЭТ радиофармпрепаратов зависит от его физико-химических характеристик, возможностей производства, доступности и временных масштабов биологического процесса, который планируется исследовать. Среди различных исследованных радиоизотопов, изотоп меди-64 (^{64}Cu), обладающий периодом полураспада, равным 12,7 ч, уникален по своим свойствам. Для него характерен распад тремя различными путями: захватом электронов (3ϵ), а также β^- - и β^+ -распадами. Соответствующие выходы процессов составляют (%): 43,5 (3ϵ), 17,5 (β^+) и 38,4 (β^-). Благодаря испусканию как β^+ -, так и β^- -частиц, этот изотоп можно использовать как для ПЭТ-визуализации, так и для направленной радионуклидной терапии [2 – 4].

За последние два десятилетия наблюдается повышенный интерес к разработке новых радиофармпрепаратов на основе изотопа ^{64}Cu , в основном благодаря хорошо известной химии меди. Этот изотоп присоединяли к различным молекулам, образующим радиофармпрепараты, которые используются как для визуализации, так и для терапии. Ниже в качестве примера приведен краткий перечень ^{64}Cu -радиофармпрепаратов и их применение в медицине [5, 6]:

^{64}Cu -ATSM – для визуализации гипоксии и рака легких;

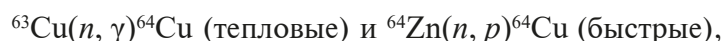
^{64}Cu -Trastuzumab – для визуализации и терапии рака молочной железы;

^{64}Cu -PSMA-617 – для визуализации рака простаты;

^{64}Cu -AE105 – для визуализации рака легких, рака толстой кишки и рака мочевого пузыря.

Рассматриваемый изотоп имеет, в частности, еще одно свойство, полезное для его медицинского применения. В своей ионной форме (в виде ионов $^{64}\text{Cu}^{2+}$) его можно использовать для ПЭТ-визуализации различных видов рака. В отличие от большинства обычных радиофармпрепаратов, применение ионов $^{64}\text{Cu}^{2+}$ не требует присоединения радиоизотопа к дорогостоящим молекулам-носителям, что значительно удешевляет технологию процесса. Отсутствие стадии радиомаркировки обеспечивает уникальное преимущество перед традиционной процедурой, поскольку после облучения мишени, обычной лабораторной радиохимической обработки достаточно для получения радиотрейсера в желаемой форме для ПЭТ-визуализации [7, 8].

Изотоп ^{64}Cu обладает еще одной важной особенностью: его можно получать как на циклотроне, так и на ядерном реакторе. В основе второй технологии лежат две ядерные реакции захвата нейтронов n :



где γ – гамма-кванты, p – протоны.

Крупномасштабное производство изотопа ^{64}Cu базируется на первой из этих реакций (захват тепловых нейтронов). Основным ограничением этого подхода является низкая удельная активность изотопа на фоне других активных примесей мишени, что делает такую технологию практически непригодной для приготовления радиофармпрепаратов.

Использование реакции захвата быстрых нейтронов также имеет множество ограничений. Поток быстрых нейтронов в активной зоне реактора, как правило, недоступен для производства изотопов. Работа большинства исследовательских реакторов в мире ограничивается также требованиями к объему мишени, что, в свою очередь, ограничивает активность получаемого изотопа ^{64}Cu [8].

Однако имеется возможность производства радиоизотопа ^{64}Cu путем ядерной реакции $^{64}\text{Ni}(p, n)^{64}\text{Cu}$ через облучение протонами обогащенного либо природного никеля на циклотроне. В настоящее время доступны автоматизированные модули для быстрого и высокоэффективного отделения изотопа ^{64}Cu от изотопа ^{64}Ni и от других радиоизотопов с помощью ионообменной хроматографии. В большинстве доклинических и клинических исследований, которые известны на сегодняшний день, использовался изотоп ^{64}Cu , полученный на циклотроне таким путем. Для развитых стран, обладающих циклотронным оборудованием высокого уровня, это, вероятно, наиболее целесообразный вариант производства требуемого изотопа для регулярного использования в клинических условиях [9, 10]. В то же время, все подобные публикации описывают получение меди на мишени из обогащенного изотопа никеля ^{64}Ni , обладающего чрезвычайно высокой стоимостью. Работа с природной смесью изотопов никеля может быть существенно выгоднее с экономической точки зрения.

Цель данной работы – получение информации об активации никелевых мишеней естественного изотопного состава.

В связи с указанной целью решались следующие задачи:

облучение фольги из природного никеля протонами с энергией 13 МэВ на циклотроне МГЦ-20 Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ);

радиохимическая обработка этой облученной фольги для разделения полученных радиоизотопов;

измерение активности изотопа ^{64}Cu ;

сравнение экспериментальных данных с расчетными результатами.

Методическая часть

Облучение фольги. Для получения изотопа ^{64}Cu достаточно использовать энергию протонов от 10 до 15 МэВ [11]. Нами была выбрана энергия 13 МэВ на циклотроне МГЦ-20 СПбПУ. В качестве мишени применяли три слоя никелевой фольги естественного изотопного состава (природная смесь) толщиной 100 мкм каждый; их суммарная толщина составляла 300 мкм, вес каждого образца – 0,09 г. Образцы имели форму дисков диаметром 12 мм (площадь – 1,13 см²).



Перед облучением с целью дополнительной очистки никелевая фольга была сперва трижды промыта в гептане C_7H_{16} (предельный углеводород), а затем трижды в изопропиловом спирте.

Чтобы закрепить три никелевых диска, подвергаемых радиации, использовали медный держатель мишени (рис. 1). Выбор меди был обусловлен ее высокой теплопроводностью, обеспечивающей отвод тепла. Диаметр поля облучения определялся геометрией держателя и составлял 10 мм. Держатель закрепляли на водоохлаждаемой подложке во избежание перегрева мишени.

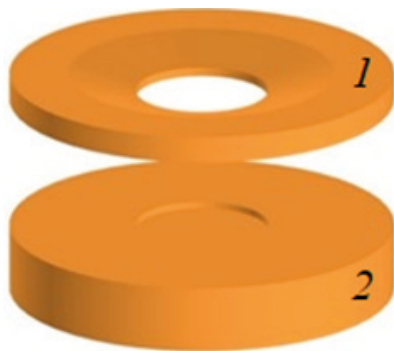


Рис. 1. Медный держатель мишени; три диска фольги закрепляли между кольцом (1) и подложкой (2)

Для облучения использовался пучок протонов с энергией 13 МэВ, ток пучка составлял 4 мкА, время облучения – 3 ч.

Радиохимическая обработка образцов. По окончании облучения процедура работы с образцами никелевой фольги для получения изотопа ^{64}Cu включала следующие этапы:

выдержка образцов в течение 12 ч, необходимая для распада короткоживущих изотопов; после этого облученную фольгу извлекали из циклотрона и помещали в бокс со свинцовой защитой;

растворение трех образцов фольги в 5 мл водного раствора соляной кислоты HCl (молярная концентрация раствора – 11,7 М) в течение 4 ч при температуре $100^\circ C$;

выпаривание раствора на глицериновой бане в течение 1 ч при температуре $185 - 200^\circ C$ до сухого осадка; полученный осадок остужали до комнатной температуры в течение 20 мин;

растворение твердого осадка в 4 мл водного раствора соляной кислоты HCl (концентрация раствора – 6,0 М) в течение 20 мин при комнатной температуре $25^\circ C$;

отбор аликвоты объемом 20 мкл из раствора известного объема (получен по окончании предыдущего этапа) для проведения гамма-спектрометрического анализа.

Спектрометрический анализ объекта. Его проводили еще через 1 ч 14 мин на спектрометре гамма-излучения, который оснащен полупроводниковым детектором на основе сверхчистого германия серии GEM-FX5825 и многоканальным цифровым анализатором типа DSPec-50.

Экспериментальные результаты

На энергетическом спектре (рис. 2) имеется пик при значении энергии 1345,77 кэВ, который относится к изотопу ^{64}Cu , что свидетельствует о его присутствии в образце. Установлено, что активность изотопа ^{64}Cu в аликвоте объемом 20 мкл составила 45 кБк (с погрешностью 30 %), тогда как полный раствор (4 мл) содержит изотоп ^{64}Cu с активностью 9 МБк. Эта активность достигается через 21 ч после облучения. Таким образом, можно заключить, что активность ^{64}Cu сразу по окончании облучения составляла 30 ± 9 МБк. Проведенный дальнейший анализ данных показал, что полученный результат измерения не противоречит результатам расчета (представлены далее).

Моделирование выхода изотопа ^{64}Cu при облучении природного никеля пучком протонов

С целью моделирования были использованы решение уравнения прохождения протонов через вещество (формула Бете – Блоха) и уравнение образования изотопа при облучении протонами мишени из природного никеля на циклотроне для определения выхода реакции $^{64}Ni(p, n)^{64}Cu$ [12]. Природный никель содержит следующие изотопы [13]:

^{58}Ni (68,00 %), ^{60}Ni (26,00 %), ^{61}Ni (1,14 %), ^{62}Ni (3,71 %) и ^{64}Ni (0,93 %).

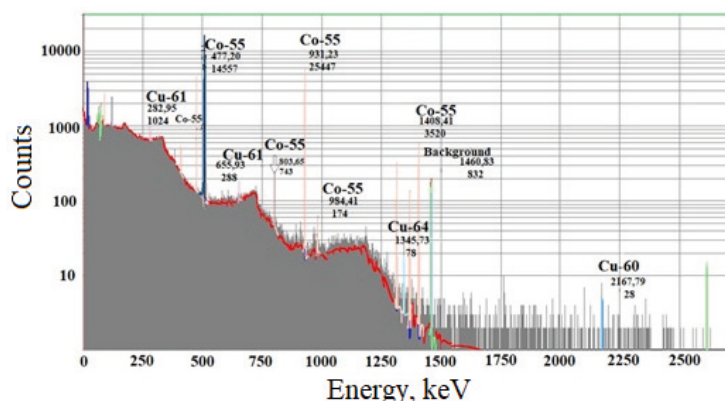


Рис. 2. Спектр от аликвоты (20 мкл), полученной из облученного препарата природной смеси изотопов никеля

На рис. 3 показана зависимость наработанной активности изотопа ^{64}Cu от толщины мишени из природного никеля при использовании протонов с начальной кинетической энергией 13 МэВ. Линия показывает зависимость, а полоса отражает погрешность ее определения, которая обусловлена погрешностью нахождения сечения реакции. Видно, что при данном значении энергии оптимальная толщина мишени для получения максимальной активности изотопа составляет 300 – 350 мкм.

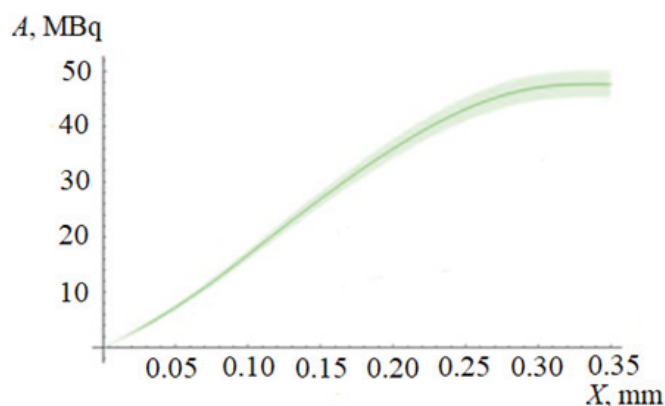


Рис. 3. Расчетная зависимость наработанной активности изотопа ^{64}Cu от толщины мишени из природного никеля при использовании протонов с начальной кинетической энергией 13 МэВ (время облучения – 3 ч)

Из результата вычисления можно определить активность изотопа ^{64}Cu при облучении мишени толщиной 300 мкм в течение 3 ч протонами с энергией 13 МэВ (ток пучка – 4 мкА). Результат проведенного моделирования показал, что активность изотопа ^{64}Cu составила 47 ± 3 МБк. Из статистического анализа данных измерений (30 ± 9 МБк) и результата расчета (47 ± 3 МБк) следует, что достигаемый уровень значимости наблюдаемого отклонения результата расчета от измерения составляет 0,07 (7 %). Достигаемый уровень значимости есть вероятность того, что отклонение результатов расчета от данных измерений за счет статистических флуктуаций составляет 7 % для проверки нулевой гипотезы. Согласно данной гипотезе, наблюдаемое различие между результатами расчетов и измерений связано со статистическими флуктуациями; тогда следует сравнивать достигаемый уровень значимости с уровнем значимости, который на практике выбирается 0,05. Поскольку достигаемый уровень значимости 0,07 превышает значение 0,05, нулевая гипотеза подтверждается, т. е. наблюдаемое различие связано со статистическими флуктуациями.



Таким образом, результаты измерения и расчета находятся в согласии при уровне значимости 0,05. Следует признать хорошее согласие экспериментальных данных с расчетными результатами.

Заключение

В данной работе описана процедура наработки изотопа ^{64}Cu на циклотроне МГЦ-20. Три фольги из природного никеля были облучены пучком протонов с энергией 13 МэВ, после чего подвергнуты радиохимической обработке. По измеренной активности изотопа ^{64}Cu было получено значение активности на момент окончания облучения, которое составило 30 ± 9 МБк. Выполненный расчет активности изотопа ^{64}Cu в условиях, соответствующих экспериментальным, дал значение 47 ± 3 МБк. Достигнутый уровень значимости наблюдаемого отклонения результата расчета от измерения составил 0,07. Таким образом установлено, что результаты расчета и измерения находятся в согласии при уровне значимости 0,05, т. е. согласие хорошее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Gambhir S. S.** Molecular imaging of cancer with positron emission tomography // *Nature Reviews Cancer*. 2002. Vol. 2. No. 9. Pp. 683–693.
2. **Asabella A. N., Cascini G. L., Altini C., Paparella D., Notaristefano A., Rubini G.** The copper radioisotopes: A systematic review with special interest to ^{64}Cu // *BioMed Research International*. 2014. Vol. 2014. May. P. 786463.
3. **Amiot M. N., Be M. M., Branger T., Cassette P., Lepy M. C., Menesguen Y., DaSilva I.** Standardization of ^{64}Cu using an improved decay scheme // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2012. Vol. 684. 21 August. Pp. 97–104.
4. **Anderson C. J., Riccardo F.** Copper-64 radiopharmaceuticals for PET imaging of cancer: Advances in preclinical and clinical research // *Cancer Biotherapy and Radiopharmaceuticals*. 2009. Vol. 24. No. 4. Pp. 379–393.
5. **Holland J. P., Riccardo F., Anderson C. J., Lewis J. S.** Copper-64 radiopharmaceuticals for oncologic imaging // *PET Clinics*. 2009. Vol. 4. No. 1. Pp. 49–67.
6. **Zhou Y., Li J., Xu X., Zhao M., Zhang B., Deng S., Wu Y.** ^{64}Cu -based radiopharmaceuticals in molecular imaging // *Technology in Cancer Research & Treatment*. 2019. Vol. 18. February 14. doi10.1177/1533033819830758.
7. **Boschi A., Martini P., Janevik-Ivanovska E., Duatti A.** The emerging role of copper-64 radiopharmaceuticals as cancer theranostics // *Drug Discovery Today*. 2018. Vol. 23. No. 8. Pp. 1489–1501.
8. **Chakravarty R., Chakraborty S., Dash A.** $^{64}\text{Cu}^{2+}$ ions as PET probe: An emerging paradigm in molecular imaging of cancer // *Molecular Pharmaceutics*. 2016. Vol. 13. No. 11. Pp. 3601–3612.
9. **Xie Q., Zhu H., Wang F., Meng X., Ren Q., Xia Ch., Yang Zh.** Establishing reliable Cu-64 production process: From target plating to molecular specific tumor micro-PET imaging // *Molecules*. 2017. Vol. 22. No. 4. P. 641.
10. **Szűcs Z., Takács S., Alirezapour B.** Development of cost-effective method for production of ^{64}Cu from ^{nat}Ni // *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. 2014. Vol. 302. No. 2. Pp. 1035–1038.
11. **Aslam M. N., Sudár S., Hussain M., Malik A. A., Shah H. A., Qaim S. M.** Charged particle induced reaction cross section data for production of the emerging medically important positron emitter ^{64}Cu : A comprehensive evaluation // *Radiochimica Acta*. 2009. Vol. 97. No. 12. Pp. 669–686.
12. **Тйба А., Бердников Я. А.** Оптимизация получения изотопа меди-64 из природного никеля на циклотроне // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2021. Т. 14. № 2. С. 81–89.
13. **Rosman K. J. R., Taylor P. D. P.** Isotopic compositions of the elements // *Pure and Applied Chemistry*. 1998. Vol. 70. No. 1. Pp. 217–235.

REFERENCES

1. **Gambhir S. S.**, Molecular imaging of cancer with positron emission tomography, *Nat. Rev. Cancer*. 2 (9) (2002) 683–693.
2. **Asabella A. N., Cascini G. L., Altini C., et al.**, The copper radioisotopes: A systematic review with special interest to ^{64}Cu , *BioMed Res. Int.* 2014 (May) (2014) 786463.
3. **Amiot M. N., Be M. M., Branger T., et al.**, Standardization of ^{64}Cu using an improved decay scheme, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*. 684 (21 August) (2012) 97–104.
4. **Anderson C. J., Riccardo F.**, Copper-64 radiopharmaceuticals for PET imaging of cancer: Advances in preclinical and clinical research, *Cancer Biother. Radiopharm.* 24 (4) (2009) 379–393.
5. **Holland J. P., Riccardo F., Anderson C. J., Lewis J. S.**, Copper-64 radiopharmaceuticals for oncologic imaging, *PET Clinics*. 4 (1) (2009) 49–67.
6. **Zhou Y., Li J., Xu X., et al.**, ^{64}Cu -based radiopharmaceuticals in molecular imaging, *Technol. Cancer Res. Treat.* 18 (February 14) (2019) doi10.1177/1533033819830758.
7. **Boschi A., Martini P., Janevik-Ivanovska E., Duatti A.**, The emerging role of copper-64 radiopharmaceuticals as cancer theranostics, *Drug Discov. Today*. 23 (8) (2018) 1489–1501.
8. **Chakravarty R., Chakraborty S., Dash A.**, $^{64}\text{Cu}^{2+}$ ions as PET probe: An emerging paradigm in molecular imaging of cancer, *Molecul. Pharmaceut.* 13 (11) (2016) 3601–3612.
9. **Xie Q., Zhu H., Wang F., et al.**, Establishing reliable Cu-64 production process: From target plating to molecular specific tumor micro-PET imaging, *Molecules*. 22 (4) (2017) 641.
10. **Szűcs Z., Takács S., Alirezapour B.**, Development of cost-effective method for production of ^{64}Cu from ^{nat}Ni , *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 302 (2) (2014) 1035–1038.
11. **Aslam M. N., Sudár S., Hussain M., et al.**, Charged particle induced reaction cross section data for production of the emerging medically important positron emitter ^{64}Cu : A comprehensive evaluation, *Radiochim. Acta*. 97 (12) (2009) 669–686.
12. **Tiba A., Berdnikov Ya. A.**, Optimization of the copper-64 isotope production from natural nickel target at a cyclotron, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics*. 14 (2) (2021) 81–89.
13. **Rosman K. J. R., Taylor P. D. P.**, Isotopic compositions of the elements, *Pure Appl. Chem.* 70 (1) (1998) 217–235.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТИБА Али – аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alitiba1991@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1320-6166

КАРАСЕВ Платон Александрович – 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
platon.karaseov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2511-0188

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

ЕГОРОВ Анатолий Юрьевич – ассистент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
egorov.a@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4936-6962

МИРОНОВА Светлана Юрьевна – инженер Научно-технологического комплекса «Ядерная физика» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Scaremonger@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-2114-716X

THE AUTHORS

TIBA Ali

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alitiba1991@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1320-6166

KARASEOV Platon A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
platon.karaseov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2511-0188

BERDNIKOV Yaroslav A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

EGOROV Anatoliy A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
egorov.a@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4936-6962

MIRONOVA Svetlana Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Scaremonger@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-2114-716X

*Статья поступила в редакцию 04.04.2022. Одобрена после рецензирования 26.04.2022.
Принята 26.04.2022.*

Received 04.04.2022. Approved after reviewing 26.04.2022. Accepted 26.04.2022.

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15207>

ANALYSING THE EFFECT OF A CRANIUM THICKNESS ON A BRAGG PEAK RANGE IN THE PROTON THERAPY: A TRIM AND GEANT4 BASED STUDY

F. Ekinçi ¹✉, E. Bostancı ², M. S. Güzel ², Ö. Dağlı ¹

¹ Gazi University, Ankara, Turkey,

² Ankara University, Ankara, Turkey

✉ fatih.ekinci2@gazi.edu.tr

Abstract. Cancer treatment with proton therapy, starting in 1946, continues with the treatment of 200,000 patients worldwide as of 2020. The energy release of protons in tissue and tissue equivalent (water) material is shown by Bragg curves. The main reason why proton beams are preferred in radiotherapy is that the proton beams continue on their way by giving maximum energy to the tissue to be treated and giving the least damage to the healthy tissue. In this study, with the help of Monte Carlo-based GEANT4 and TRIM simulation programs, Bragg peak positions in the 60 – 130 MeV energy range are given for water and brain by using the relativistic Bethe – Bloch equation. The difference between GEANT4 and TRIM was 7.4 % on average in the water phantom, while the difference was 7.6 % in the brain phantom. Bragg peak position was calculated for water and brain phantoms at 0.6, 0.8 and 1.0 cm thicknesses, which is suitable for the average thickness of the cortical bone in the skull. An average of 8.1 and 7.8 % deviations were detected between the two simulation systems in the cortical bony, water and brain phantoms with three different thicknesses. The values found were compared with the clinical studies available in the literature.

Keywords: Monte Carlo, GEANT4, TRIM, radiation therapy, proton therapy, LET

For citation: Ekinçi F., Bostancı E., Güzel M. S., Dağlı Ö., Analysing the effect of a cranium thickness on a Bragg peak range in the proton therapy: a TRIM and GEANT4 based study, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 64–78. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15207>

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

Научная статья

УДК 615.849.12

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15207>

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ ТКАНЕЙ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО ЧЕРЕПА НА ДИАПАЗОН ПИКОВ БРЭГГА ПРИ ПРОТОННОЙ ТЕРАПИИ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММ TRIM И GEANT4

Ф. Экинджи ¹✉, Э. Бостанджи ², М. С. Гузель ², О. Дагли ¹

¹ Университет Гази, г. Анкара, Турция;

² Университет Анкары, г. Анкара, Турция

✉ fatih.ekinci2@gazi.edu.tr

Аннотация. Лечение рака с помощью протонной терапии, начатое в 1946 году, продолжает развиваться по всему миру, и, например, в 2020 г. этот метод применяли



у 200 тыс. пациентов. Энерговыделение протонов в человеческой ткани и тканевом эквиваленте (воде) контролируется кривыми Брэгга. Преимущество протонных лучей заключается в том, что они отдают максимальную энергию обрабатываемой ткани, проникая вглубь, и при этом наносят минимальный ущерб здоровым тканям. В данном исследовании представлены позиции пиков Брэгга в диапазоне энергий 60 – 130 МэВ для воды и мозга, полученные с помощью уравнения Бете – Блоха и программ моделирования GEANT4 и TRIM (основаны на методе Монте-Карло). Сравнение результатов, полученных через GEANT4 и TRIM, показало разницу в среднем 7,4 % для водного фантома и 7,6 % для мозгового. Положения пиков Брэгга были рассчитаны для фантомов воды и мозга при значениях толщины тканей 0,6, 0,8 и 1,0 см, что соответствует средней толщине коркового слоя черепной кости. Значения отклонений между двумя системами моделирования, составили в среднем 8,1 и 7,8 % для двух фантомов (три значения толщины тканей). Полученные в работе расчетные значения были сопоставлены с данными опубликованных клинических исследований.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, GEANT4, TRIM, лучевая терапия, протонная терапия, LET

Для цитирования: Экинджи Ф., Бостанджи Э., Гузель М. С., Дагли О. Анализ влияния толщины тканей человеческого черепа на диапазон пиков Брэгга при протонной терапии с помощью программ TRIM и GEANT4 // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 64–78. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15207>

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

Introduction

Heavy ion beams have been the focus of radiation oncology for over 60 years due to their superior physical and biological properties compared to conventional high-energy photon beams [1]. Protons are currently used in more than 61 facilities worldwide [2], there are 16 centers in clinical operation in Europe, and many centers are under construction [3]. A single energy heavy ion beam releases most of its energy in a narrow depth range known as the Bragg peak, with the peak dose depth determined by the ion species and target properties [4]. Due to the narrow depth range of the Bragg peak, minimal lateral scattering [5, 6] combined with the high relative biological activity of heavy ions, heavy ion therapy provides a therapeutic dose that is well suited for the target volume, with an input dose much lower than it is possible with photon therapy [7]. Heavy-ion beams minimize damage to adjacent healthy tissues, which is particularly useful for treating deeply located tumors [4, 7]. However, due to large dose gradients, deviations between the treatment plan and the delivered dose distribution can have serious adverse effects on healthy tissue, especially if the treatment site is close to the organ at risk. Accurate, real-time measurement of dose distribution during irradiation minimizes errors between the treatment plan and the actual delivered dose [7]. The success of heavy ion therapy depends on accurate dose measurement and dosimetric accuracy obtained with the help of semi-analytical pencil beam algorithms [8].

Regarding the accuracy in dose measurement, general purpose Monte Carlo (MC) codes are considered the "gold standard" [9]. Different MC simulation codes are used in proton therapy centers to improve dose estimations over standard methods using analytical or semi-empirical dose algorithms [10 – 14]. Potentially adopting systematic and user-friendly use of general-purpose MC tools for quality assurance (QA) and research requires reliable as well as generally applicable interfaces for connecting MC tools and incorporating them into the radiation oncology workflow [15]. GEANT4 and TRIM MC simulation codes are used in proton therapy applications to compare energy distributions in simple water phantoms, phantoms with complex structures, and phantoms with voxelized geometry based on clinical CT data [16]. An advantage of using Geant4 and TRIM is that both are based on the MC method, which can yield the secondary knock-on atom (SKA) energy spectrum of a composite material or alloy, whereas the analytical INtegrated

model for Competitiveness Assessment of SMRs (INCAS) code only describes cascades in pure metal [17]. Another advantage is that Geant4 and TRIM provide the spatial distribution of displacements [20]. In other words, the effect of neutron spectrum and dispersion or material shape on the distributions of defects and production rates can be simulated using this method [17].

In this study, the Bragg curves formed by the proton beam in both a homogeneous water phantom and a heterogeneous one such as the brain were confirmed by experimental and computational studies in the literature with the help of frequently used GEANT4 and TRIM MC simulation systems. The behavior of the therapeutic proton beam was found with the help of two simulation systems in the presence of 0.6, 0.8 and 1.0 cm thick cortical bone placed in front of both the water phantom and brain one. All the data from the two simulation systems were compared.

Materials and methods

Monte Carlo (MC) codes are a simulation technique developed for highly accurate solutions of analytically complex problems in dose measurements [9]. So the MC is capable of following and calculating all interactions of particles within the target [18]. One of these simulation systems is the TRIM (TRANsport of Ions in Matter) simulation program. Parameters such as the type of targeted particle beam, the particle number, energy, the structural and geometric properties of the target, the angle of incidence of the particle beam at the target and the probability number can be entered from the TRIM screen. TRIM saves and displays all calculation fields. TRIM calculates and tabulates all kinetic events related to the interaction processes of ions with the target, such as damage, scattering, ionization, phonon production and recoil [19]. The displacement of the target atoms caused by the collision cascades and the cavities occurring in the target crystal structure are calculated in detail. The number of displacement collisions of the target atoms indicates how many target atoms are activated at energies above the displacement energy. The spaces left behind when the recoil atom leaves its original region are called target spaces. A vacuum does not occur unless a moving atom hits the target's stationary atom and transfers enough energy to displace it [19, 20]. The "Detailed Calculation with Full Damage Cascades" type option was selected in the calculations from the display window of the TRIM program. The particle number of the heavy ion beam was entered as 106 particles in the "Total Number of Ions" tab. Calculation outputs were declared in the "Output disk files" tab, and the ion range, recoils, sputtered atoms and collision details output files were selected. The phantom type was created in the "Compound Dictionary" tab and its geometry was created in the "Add New Layer" section.

The GEANT4 (GEometry ANd Tracking, version 4) is an MC-based simulation program, capable of simulating all interactions of the ions passing through the material in the target. GEANT4 consists of two user classes, "Mandatory Classes" and "Action Classes", in simulation software [21]. In this study, mandatory classes G4V User Detector Construction, G4V User Primary Generator Action and G4V User Physics List were used. As for the action classes, G4 User Run Action, G4 User Event Action, G4 User Stacking Action, G4 User Tracking Action and G4 User Stepping Action classes were used. The simulation detector is designed as a cube-shaped ion chamber with an edge length of 1 cm and quenching gas Ar. The step range (Range cut) was taken as 0.01 cm.

The most important problem for radiotherapy is whether the desired dose can be delivered to the target point correctly. To this end, attempts were made to determine and calibrate the correct dose using the water phantom before radiation therapy [19]. Since the basic component of the human body is water, it is the most important material frequently used in the field of medical physics. Reliability of dose and LET calculations for the water target and accurate calculation of their distribution are reliable for patient treatments. In this regard, the structure, shape and design of the phantom to be used are important. In the literature, some phantom types used in treatment planning for different regions and organs of the human body in radiotherapy applications are described [22]. Plate and cylindrical phantoms are actively used to investigate dose or LET distribution and the factors affecting them [23]. For this reason, the phantom of the skull was used in the study (see its cross-section in Fig. 1). First, a phantom consisting only of water and brain tissues was used. Next, we took a cranial section of 0.6, 0.8 and 1.0 cm thick in the horizontal direction from left to right, and then a head half section containing enough water and brain tissue

to reach a total thickness of 15 cm. Densities and basic compositions of tissues are given in Table 1. The TRIM simulation program determined these percentages according to the ICRU-276 report [24]. In the Geant4 simulation program, it was obtained from the Geant4 library (such as G4_WATER, G4_BRAIN_ICRP) [21].

In this study, cross-section phantom was used. The main motivation for using this phantom was to explore the effect of ionization of the proton beam when its passing through different layers of biomaterials. It is very difficult to process this research data in two different simulation systems using the same input directory. An account must be taken of the facts that TRIM only allows a single or multi-layer structured phantom, creates difficulties for 3D computation, and finally, such a computation will not make a significant contribution to achieving the goal of the study. For this reasons, calculations were made only in 1D single and multi-layer structures.

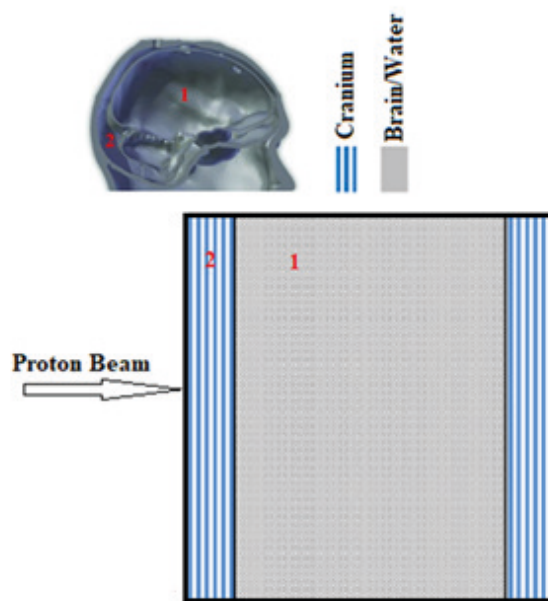


Fig. 1. The phantom cross-section geometry:
 1 – water or brain, 2 – cranium; section 2 is removed only for brain and water measurements

Table 1

The main information about biomaterials used in the cross-section phantom [25, 26]

Biomaterial	Atomic percentage, %	Atomic density, 10^{22} atom/cm ³	Density, g/cm ³
Cranium	H 3.4; O 43.5; C 15.5; N 4.2; S 0.3; Ca 22.5; P 10.3; Mg 0.2	9.946	1.92
Brain	H 10.7; C 14.5; N 2.2; O 71.2; Cl 0.3; Na 0.2; P 0.4; S 0.2; K 0.2	8.879	1.04
Water	H 66.6; O 33.3	10.020	1.00

Results

In this study, the effect of ionization interactions of protons passing through single or multiple layers on Bragg peak point was investigated for a cross-section phantom. The energy transferred per unit length of the proton beam to the layer or layers was taken into account. Therefore, the energy stored by the layer or layers per mass did not matter. In this connection, it was repeated in both simulation systems, taking into account the LET calculation. The Bragg peak positions (normalized to the maximum dose) for the water phantom irradiated by proton beams with different energies, in comparison with the experimental dose measurements of the Germany Rinecker Proton Therapy Center (RPTC) [27] are presented in Table 2. An average difference of 0.62 cm between RPTC and TRIM and that of 0.26 cm between RPTC and GEANT4 was found in the 90 – 130 MeV energy range.

Bragg peak points produced by the proton beams in the water phantom and obtained using TRIM and GEANT4 simulations are given in Table 3 and Figs. 2 and 3. As the energy of the proton beam increased, the difference between the Bragg peaks measured in the two simulation systems approached the difference ($\leq 5\%$) acceptable in medical physics. An average difference of 7.37 % difference was found for all proton beam energies between the two simulation systems.

Table 2

Bragg peaks for proton beams with different energies in the water phantom: comparison with RPTC experimental data [36]

Energy, MeV	TRIM (<i>a</i>)	GEANT (<i>b</i>)	RPTC (<i>c</i>)	Difference	
				(<i>a</i>) – (<i>c</i>)	(<i>b</i>) – (<i>c</i>)
90	6.21	5.65	5.50	0.71	0.15
100	7.26	6.98	6.83	0.43	0.15
110	9.00	8.70	8.28	0.72	0.42
120	10.50	10.18	9.80	0.70	0.38
130	12.00	11.65	11.45	0.55	0.20

Table 3

Calculation results for Bragg peak points produced by proton beams with different energies in the water phantom (using TRIM and GEANT4 simulation) and percentage differences

Energy, MeV	TRIM (<i>a</i>)	GEANT (<i>b</i>)	Difference, % (<i>a</i>) – (<i>b</i>)
60	2.82	2.42	14.18
70	3.91	3.41	12.79
80	5.01	4.52	9.78
90	6.21	5.65	9.02
100	7.26	6.98	3.86
110	9.00	8.70	3.33
120	10.5	10.18	3.05
130	12.00	11.65	2.92

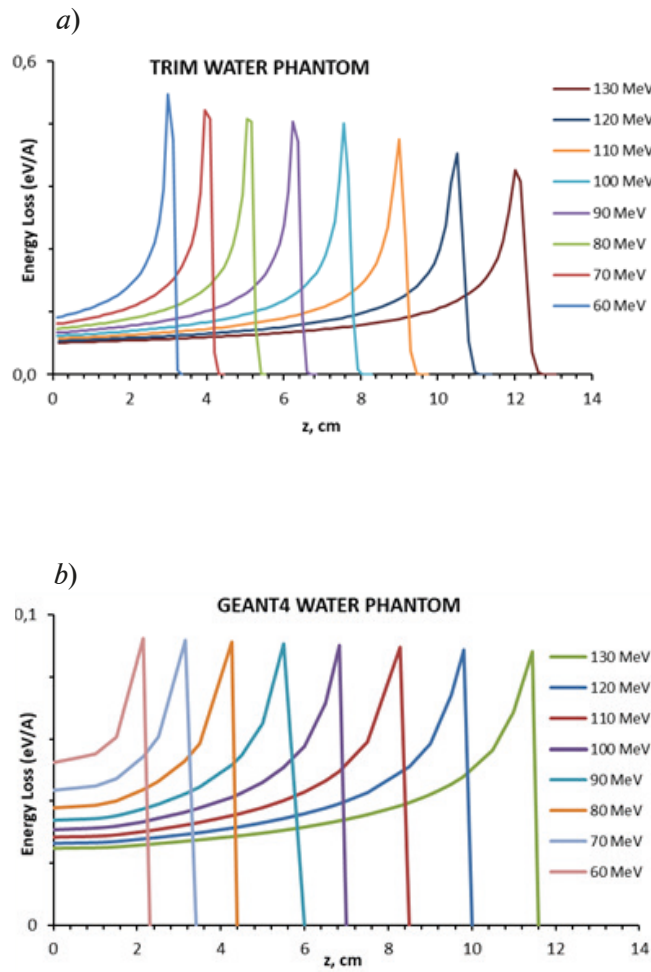


Fig. 2. Representation of Bragg curves for a 60 – 130 MeV proton beam in the water phantom from TRIM (a) and GEANT4 (b) simulation programs

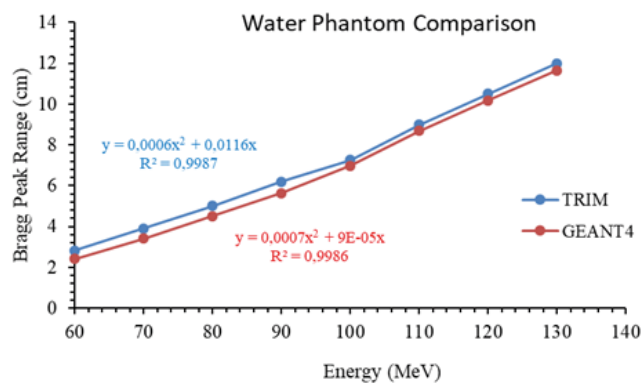


Fig. 3. Comparison of Bragg peaks for proton beams with different energies sent to the water phantom in two simulation systems

Table 4

Calculation results for Bragg peaks produced in the brain phantom by proton beams with different energies (TRIM and GEANT4 simulations were used) and percentage differences

Energy, MeV	TRIM (<i>a</i>)	GEANT4 (<i>b</i>)	Difference, % (<i>a</i>) – (<i>b</i>)
60	2.85	2.47	13.33
70	4.01	3.51	12.47
80	5.11	4.55	10.96
90	6.33	5.72	9.64
100	7.37	7.03	4.61
110	9.24	8.91	3.57
120	10.68	10.31	3.46
130	12.35	12.04	2.51

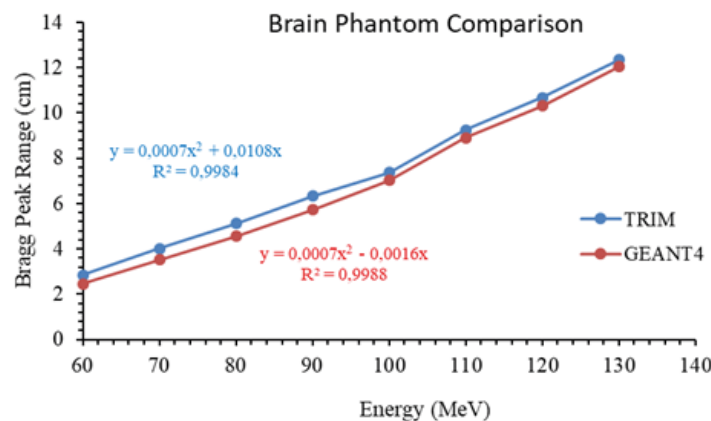


Fig. 4. Comparison of Bragg peaks produced in the brain phantom by proton beams with different energies (the two simulation codes were used)

The largest difference was observed for the proton beam of 60 MeV and the smallest one was for the proton beam of 130 MeV. It was established that there was an average difference of 0.4 cm between the two simulation systems. This result is considered to be reasonable and acceptable.

Table 4 and Fig. 4 present Bragg peak points produced by the proton beams in the brain phantom. These results were obtained in accordance with the parameters given in Table 1 and by using the TRIM and GEANT4 simulations.

As the energy of the proton beam increased, the difference between the Bragg peaks measured in the two simulation systems approached the difference ($\leq 5\%$) acceptable in medical physics. An average difference of 7.57% was found between the two simulation codes for all proton beam energies. The largest difference occurred in the proton beam of 60 MeV and the smallest one did in the proton beam of 130 MeV. An average difference of 0.43 cm between the two simulation systems was obtained. These results are considered to be reasonable and acceptable.

In the phantom geometry of the head section (see Fig. 1), the section 1 is water; the cranium 2 was selected in three different thicknesses: of 0.6, 0.8 and 1.0 cm. Using TRIM and GEANT4 simulations, the Bragg peak points produced by the proton beams in the phantom were calculated (Table 5).



Table 5

Calculation results for Bragg peaks produced in the *water phantom* with different cortical bone thicknesses by proton beams (the two simulation systems were used) and their differences

W , MeV	Cortical bone thickness for water phantom						Difference		
	0.6 cm		0.8 cm		1.0 cm		(a)–(b)	(c)–(d)	(e)–(f)
	TRIM (a)	GEANT4 (b)	TRIM (c)	GEANT4 (d)	TRIM (e)	GEANT4 (f)			
60	2.65	2.28	2.53	2.19	2.38	2.06	<u>0.37</u> 13.96%	<u>0.34</u> 13.44%	<u>0.32</u> 13.45%
70	3.59	3.12	3.48	3.04	3.36	2.93	<u>0.47</u> 13.09%	<u>0.44</u> 12.64%	<u>0.43</u> 12.80%
80	4.68	4.21	4.58	4.09	4.48	3.97	<u>0.47</u> 10.04%	<u>0.49</u> 10.70%	<u>0.51</u> 11.38%
90	5.93	5.34	5.85	5.26	5.58	5.02	<u>0.59</u> 9.95%	<u>0.59</u> 10.09%	<u>0.56</u> 10.04%
100	7.18	6.53	7.11	6.41	6.88	6.24	<u>0.65</u> 9.05%	<u>0.70</u> 9.85%	<u>0.64</u> 9.30%
110	8.58	8.24	8.53	8.18	8.32	8.02	<u>0.34</u> 3.96%	<u>0.35</u> 4.10%	<u>0.30</u> 3.61%
120	10.14	9.85	9.95	9.65	9.79	9.48	<u>0.29</u> 2.86%	<u>0.30</u> 3.02%	<u>0.31</u> 3.17%
130	11.71	11.51	11.53	11.45	11.36	11.28	<u>0.20</u> 1.71%	<u>0.08</u> 0.69%	<u>0.08</u> 0.70%

Notation: W is the proton beam energy.

An analysis of the obtained results makes possible to conclude that the difference between the two simulation programs decreased as the energy of the proton beam increased in all three cranium thicknesses. The Bragg peak difference between the two simulation codes was 8 % on average for all three cranium thicknesses. The average Bragg peak difference between the two simulation codes was 0.42 cm at 0.6 cm cranium thickness, 0.41 cm at 0.8 cm cranium thickness and 0.39 cm at 1.0 cm cranium thickness. For 0.6 cm cranium thickness, an average difference of 0.28 cm was found in TRIM between the Bragg peaks (see Tables 4 and 5), while a difference of 0.30 cm was found in GEANT4. Similarly, an average difference of 0.39 cm in TRIM and of 0.41 cm in GEANT4 were found for 0.8 cm cranium thickness, 0.57 cm in TRIM and 0.56 cm in GEANT4 for 1.0 cm cranium thickness. The differences found in the two simulation codes were considered to be at an acceptable level.

In the phantom cross-section (see Fig. 1 again), the section (1) is the brain tissue and the cranium (2) was selected in three different thicknesses: of 0.6, 0.8 and 1.0 cm. The Bragg peaks produced by the proton beams in the brain phantom are given in Table 6 (TRIM and GEANT4 simulations were used). Analyzing this data, it was seen that the difference between the two simulation programs decreased as the energy of the proton beam increased in all three cranium thicknesses. The average Bragg peak difference between the two simulation codes was 0.41 cm for 0.6 cm cranium thickness, 0.41 cm for 0.8 cm cranium thickness and 0.35 cm for 1.0 cm cranium thickness.

Discussion

In the presented study, the Bragg curves obtained by the virtual proton beams in the phantoms both homogeneous (the water) and heterogeneous (the brain) were confirmed by experimental data. The results obtained in the two simulation systems were found to be in agreement with

Table 6

Calculation results for Bragg peaks produced in the *brain phantom* with different cortical bone thicknesses by proton beams (the two simulation systems were used) and their differences

W , MeV	Cortical bone thickness for brain phantom						Difference		
	0.6 cm		0.8 cm		1.0 cm				
	TRIM (a)	GEANT4 (b)	TRIM (c)	GEANT4 (d)	TRIM (e)	GEANT4 (f)	(a)–(b)	(c)–(d)	(e)–(f)
60	2.65	2.26	2.52	2.18	2.40	2.08	$\frac{0.39}{14.72\%}$	$\frac{0.34}{13.49\%}$	$\frac{0.32}{13.33\%}$
70	3.58	3.10	3.48	3.05	3.32	2.95	$\frac{0.48}{13.41\%}$	$\frac{0.43}{12.36\%}$	$\frac{0.37}{11.15\%}$
80	4.68	4.22	4.57	4.07	4.46	3.98	$\frac{0.46}{9.83\%}$	$\frac{0.50}{10.94\%}$	$\frac{0.48}{10.76\%}$
90	5.92	5.35	5.84	5.26	5.49	5.04	$\frac{0.57}{9.63\%}$	$\frac{0.58}{9.93\%}$	$\frac{0.45}{8.20\%}$
100	7.17	6.54	7.12	6.41	6.86	6.25	$\frac{0.63}{8.79\%}$	$\frac{0.71}{9.97\%}$	$\frac{0.61}{8.89\%}$
110	8.56	8.25	8.51	8.19	8.29	8.05	$\frac{0.31}{3.62\%}$	$\frac{0.32}{3.76\%}$	$\frac{0.24}{2.90\%}$
120	10.12	9.84	9.94	9.66	9.76	9.49	$\frac{0.28}{2.77\%}$	$\frac{0.28}{2.82\%}$	$\frac{0.27}{2.77\%}$
130	11.69	11.53	11.52	11.44	11.32	11.27	$\frac{0.16}{1.37\%}$	$\frac{0.08}{0.69\%}$	$\frac{0.05}{0.44\%}$

Notation: W is the proton beam energy.

the experimental data. It has been observed that the Bragg peak position formed by the proton beam in the energy range of 60 – 130 MeV is different from the water and brain phantom. This difference averages 0.15 cm for TRIM and 0.13 cm for GEANT4. Thus, it was seen in both simulation systems that the Bragg peak position formed by the proton beam was deeper in the brain phantom. The difference between the Bragg peak positions of the proton beam and TRIM and GEANT4 simulations; it was found to be 7.4 % in the water phantom and 7.6 % in the brain one. We believe that the difference arises from atomic collisions, since brain tissue contains different atoms. Further studies are needed to cover the entire range of beam energies, target thicknesses and target materials, mainly, for therapeutic applications in this area.

Experimental measurements are also required to compare Monte Carlo codes [28 – 32]. In a different study, where microdosimetric measurements of monoenergetic and modulated Bragg peaks of 62 MeV therapeutic proton beam were performed with a synthetic single crystal diamond microdosimeter, it was seen that the data of GEANT4 and TRIM [33] were comparable, as it was in our study. In another study with GEANT4 and TRIM, the ionizations of proton beams on different targets were examined, and it was seen that the results were close to each other similar to our results [34, 35].

In order to understand the behavior of the Bragg peak in cortical bone, being denser than the water and brain, the same calculations were repeated and compared using the selected TRIM and GEANT4 simulation programs. Thus, the Bragg peak positions formed in the water phantom (made with TRIM) and the cortical bony water phantom of three different thicknesses were compared. Average differences of 0.28 cm for 0.6 cm thickness, 0.39 cm for 0.8 cm thickness and 0.57 cm for 1.0 cm thickness were found. Comparing the Bragg peak positions in the water phantom simulated in GEANT4 by a similar method and in the water phantom of a cortical bone with three different thicknesses, we determined an average difference of 0.30 cm for 0.6 cm thickness, 0.41 cm for 0.8 cm thickness and 0.56 cm for 1.0 cm thickness.



Comparing TRIM and GEANT4 in water phantom and the cortical bony water phantom with three different thicknesses by the same method, we found an average difference of 0.42 cm for 0.6 cm thickness, an average difference of 0.41 cm for 0.8 cm thickness, and an average difference of 0.39 cm for 1.0 cm thickness. Then the brain phantom and the one with three different thicknesses of cortical bones were compared. The difference in 0.6 cm thickness was found to be 0.41 cm on average, the difference in 0.8 cm thickness was 0.41 cm on average, and the difference in 1.0 cm thickness was 0.35 cm on average. These differences were found to be 8.0 % on average. The calculations used in our studies include a probability due to the properties of the Monte-Carlo computing. Therefore, the calculations from the two simulation programs were consistent.

The effect of materials of different densities and thicknesses on the proton beam is important for proton therapy [36]. For this reason, the proton beam passing through the cooling materials of different thicknesses was investigated in Geant4 and TRIM MC simulation codes. The results of the available simulations were also compared with the calculation results based on the NIST PSTAR and CSDA models, and the differences were presented in the same way as in this publication [37]. In similar studies, particularly in the study of demonstrating this effect with different simulation systems, the results obtained by Geant4 were compared with those obtained by TRIM [36, 38]. The change exhibited by the proton beam in the presence of cortical bone of different thickness used for both phantoms was compared with previous data and showed a good agreement [5, 6, 14]. In addition, considering the advantages of the two simulation systems, the recoil interactions of the proton beams within the target were investigated. The obtained results were also compared in the same way as in this study [39]. The ion spacing was estimated using the TRIM code and was found to be compatible with that obtained by GEANT4 [40].

In the literature, some authors tried to find Bragg peak positions performing calculations of Bragg curves given by proton beams with 100, 120 and 130 MeV energies while their passing through the water phantoms, using different MC-based simulation programs (FLUKA, GATE, MCNPX, PTRAN and PHITS). Then they tried to compare the results obtained (similar to the procedure taken in our study). Bragg peak positions obtained in the literature were compared with the values determined in this study. In this comparison, an average difference of 4.1 % in TRIM and 7.5 % in GEANT4 was found for a proton beam with 100 MeV energy [41–46]. An average difference of 1.4 % in TRIM and 1.7 % in GEANT4 was found in the 120 MeV energy proton beam [41, 47]. An average difference of 6.7 % in TRIM and 3.9% in GEANT4 was found in the proton beam with 130 MeV energy [44]. It has been seen that this difference is due to the features of MC simulation, calculation parameters and statistical reasons such as probability.

Summary

Since there is no experimental heavy ion beam line, it was decided to use MC TRIM and GEANT4 simulation programs in this study. In keeping with the current approach, a water phantom was used to validate patient radiotherapy plans for heavy ion therapy. We report on MC TRIM and GEANT4 data on LET values of four new proton beams in water and brain phantoms with energies ranging from 60 to 130 MeV/u in increments of 10 MeV and in cortical bony water and brain phantoms of different thicknesses (0.6, 0.8 and 1.0 cm). These values were compared with hospital data and other studies in the literature. It has been suggested to be repeated in Teflon, titanium alloys ($\text{Ti}_6\text{Al}_4\text{V}$ and Nital) and Al_2O_3 ceramic alloys [15], which give the closest results to bone among the biomaterials used instead of cortical bone. In these studies, recoil effects, besides ionization, were considered and compared using the TRIM and GEANT4 simulation system.

REFERENCES

1. **Durante M., Loeffler J. S.**, Charged particles in radiation oncology. *Nature Rev. Clin. Oncol.* 7 (1) (2010) 37–43.
2. Particle therapy co-operative group (PTCOG). An organization for those uninterested in proton, light ion and heavy charged particle radiotherapy. URL: <https://www.ptcog.ch/>. Accessed: 2019-10-10.
3. **Kozłowska W. S., Böhlen T. T., Cuccagna C., et al.**, FLUKA particle therapy tool for Monte Carlo independent calculation of scanned proton and carbon ion beam therapy, *Phys. Med. Biol.* 64 (7) (2019) 075012.

4. **Schardt D., Elsässer T., Schulz-Ertner D.**, Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits, *Rev. Mod. Phys.* 82 (1) (2010) 383–425.
5. **Senirkentli G. B., Ekinci F., Bostanci E., Güzel M. et al.**, Proton therapy for mandibula plate phantom, *Healthcare.* 9 (2) (2021) 167.
6. **Ekinci F., Bostanci E., Dağlı Ö., Güzel M. S.**, Analysis of Bragg curve parameters and lateral straggle for proton and carbon beam, *Commun. Fac. Sci. Univ. Ank., Ser. A2–A3.* 63 (1) (2021) 32–41.
7. **Chacon A., Safavi-Naevini M., Bolst D., et al.**, Monte Carlo investigation of the characteristics of radioactive beams for heavy ion therapy, *Sci. Rep.* 9 (1) (2019) 6537.
8. **Hong L., Goitein M., Bucciolini M., et al.**, A pencil beam algorithm for proton dose calculations, *Phys. Med. Biol.* 41 (8) (1996) 1305–1330.
9. **Rogers D. W. O.**, Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics, *Phys. Med. Biol.* 51 (13) (2016) R287–R301.
10. **Baiocco G., Barbieri S., Babini G., et al.**, The origin of neutron biological effectiveness as a function of energy, *Sci. Rep.* 6 (September) (2016) 34033.
11. **Kajimoto T., Tanaka K., Endo S., et al.**, Double differential cross sections of neutron production by 135 and 180 MeV protons on A-150 tissue-equivalent plastic, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 487 (15 January) (2021) 38–44.
12. **Kurosu K., Das I. J., Moskvina V. P.**, Optimization of GATE and PHITS Monte Carlo code parameters for spot scanning proton beam based on simulation with FLUKA general-purpose code, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 367. (15 January) (2016). 14–25.
13. **Lund C. M., Famulari G., Montgomery L., Kildea J.**, A microdosimetric analysis of the interactions of mono energetic neutrons with human tissue, *Physica Medica.* 73 (May) (2020) 29–42.
14. **Ekinci F, Bölükdemir M. H.**, The effect of the second peak formed in biomaterials used in a slab head phantom on the proton Bragg peak, *J. Polytech.* 23 (1) (2019) 129–136.
15. **Augusto R. S., Bauer J., Bouhali O., et al.**, An overview of recent developments in FLUKA PET TOOLS, *Physica Medica.* 54 (October) (2018) 189–199.
16. **Titt U., Bednarz B., Paganetti H.**, Comparison of MCNPX and Geant4 proton energy deposition predictions for clinical use, *Phys. Med. Biol.* 57 (20) (2012) 6381–6393.
17. **Wu J.-C., Feng Q.-J., Liu X.-K., et al.**, A combination method for simulation of secondary knock-on atoms of boron carbide induced by neutron irradiation in SPRR-300, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 368 (1 February) (2016) 1–4.
18. **Ogilvy C. S., Stieg Ph. E., Awad I., et al.**, Recommendations for the management of intracranial arteriovenous malformations, *Stroke.* 32 (6) (2001) 1458–1471.
19. **Shaller C., Schramm J., Huan D.**, Significance of factors contributing to surgical complications and to late outcome after elective surgery of cerebral arteriovenous malformations, *J. Neurol. Neurosurg. Psychiat.* 65 (4) (1998) 547–554.
20. **Ogilvy C. S.**, Radiation therapy for arteriovenous malformations: a review, *Neurosurg.* 26 (5) (1990) 725–735.
21. Geant4. URL: <http://www.geant4.org/geant4/>, Son Erişim Tarihi: 20.04.2016.
22. **Jafar J. J., Davis A. J., Berenstein A., et al.**, The effect of embolization with N-butyl cyanoacrylate prior to surgical resection of cerebral arteriovenous malformations, *J. Neurosurg.* 78 (1) (1993) 60–69.
23. **Behrens R., Hupe O.**, Influence of the phantom shape (slab, cylinder or Alderson) on the performance of an Hp(3) eye dosimeter, *Rad. Protect. Dosim.* 168 (4) (2015) 441–449.
24. **Van Rooij W. J., Sluzewski M., Beute G. N.**, Brain AVM embolization with Onyx, *Am. J. Neurorad.* 28 (1) (2007) 172–178.
25. **Ziegler J. F.** SRIM – The stopping and range of ion in matter (2007). URL: <https://www.srim.org/> Accessed: 20.09.2019.
26. ICRU-1992: Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues, Report 46 of The International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), National Bureau of Standards, USA: US Department of Commerce, 1992.
27. Rinecker Proton Therapy Center (RPTC), Munich, Germany. URL: <https://www.rptc.de/en/home.html>. Son Ulaşım: 20 Aralık 2017.
28. **Battistoni G., Cerutti F., Fassò A., et al.**, The FLUKA code: description and benchmarking, *AIP Conf. Proc.* 896 (2007) 31–49.
29. **Mairani A.**, Nucleus-nucleus interaction modelling and applications in ion therapy treatment



planning, PhD Thesis, University of Pavia, Italy (2017).

30. **Böhlen T. T., Cerutti F., Chin M. P. W., et al.**, The FLUKA code: Developments and challenges for high energy and medical applications, *Nucl. Data Sheets*. 120 (June) (2014) 211–214.

31. **Dudouet J., Cussol D., Durand D., Labalme M.**, Benchmarking GEANT4 nuclear models for hadron therapy with 95 MeV/nucleon carbon ions, *Phys. Rev. C*. 89 (5) (2014) 054616.

32. **Aricò G., Gehrke T., Gallas R., et al.**, Investigation of single carbon ion fragmentation in water and PMMA for hadron therapy, *Phys. Med. Biol.* 64 (5) (2019) 055018.

33. **Verona C., Cirrone G. A. P., Magrin G., et al.**, Microdosimetric measurements of a monoenergetic and modulated Bragg peaks of 62 MeV therapeutic proton beam with a synthetic single crystal diamond microdosimeter, *Med. Phys.* 47 (11) (2020) 5791–5801.

34. **Wu Z., Chen S.**, Heavy ion, proton and neutron charge deposition analyses in several semiconductor materials, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 65 (8) (2018) 1791–1799.

35. **Du Q., Lin S. T., He H. T., et al.**, Response of gadolinium doped liquid scintillator to charged particles: measurement based on intrinsic U/Th contamination, *J. Instrum.* 13 (4) (2018) P04001.

36. **Mastromarco M., Digennaro A., Mazzone A., et al.**, Proton boron capture therapy: Dose calculations and a possible new measurement, *RAD Conf. Proc.* 4 (2020) 185–189.

37. **Yevseyeva O., de Assis J., Yevseev I., et al.**, Comparison of GEANT4 simulations with experimental data for thick Al absorbers, *AIP Conf. Proc.* 1139 (2009) 97–101.

38. **Liu T. Q., Lic D. Q., Caic C., et al.**, Heavy ion track straggling effect in single event effect numerical simulation of 3D stacked devices, *Microelectr. Rel.* 114 (November) (2020) 113853.

39. **Zheng Y., Zheng J., Wang X.**, Study on the applicability of neutron radiation damage method used for high-temperature superconducting tape based on Geant4 and SRIM, *Sci. Technol. Nucl. Instal.* (24 November) (2021) ID 2839746.

40. **Parida M. K., Prabakar K., Prasanna G., Sundari S. T.**, Efficiency of boric acid coated semiconductor neutron detector – A GEANT4 simulation study, In: *Proc. The 14th IEEE India Council International Conference (INDICON), 2017*. doi:10.1109/indicon.2017.8487978.

41. **Schwarz M.**, Treatment planning in proton therapy, *Europ. Phys. J. Plus.* 126 (7) (2011) 67.

42. **Jia X., Schümann, J., Paganetti, H., ve Jiang S. B.**, GPU-based fast Monte Carlo dose calculation for proton therapy, *Phys. Med. Biol.* 57 (23) (2012) 7783.

43. **Yang Z. Y., Tsai P. E., Lee S. C., et al.**, Inter-comparison of dose distributions calculated by FLUKA, GEANT4, MCNP, and PHITS for proton therapy, *Europ. Phys. J., Web of Conf.* 153 (2017) 04011.

44. **Jia S. B., Hadizadeh M. H., Mowlavi A. A., ve Loushab M. E.**, Evaluation of energy deposition and secondary particle production in proton therapy of brain using a slab head phantom, *Rep. Pract. Oncol. Radiother.* 19 (6) (2014) 376–384.

45. **Sterpin E., Sorriaux J., Vynckier S.**, Extension of PENELOPE to protons: Simulation of nuclear reactions and benchmark with Geant4, *Med. Phys.* 40 (11) (2013) 111705.

46. **Grimes D. R., Warren D. R., Partridge M.**, An approximate analytical solution of the Bethe equation for charged particles in the radiotherapeutic energy range, *Sci. Rep.* 7 (1) (2017) 9781.

47. **Almhagen E.**, Development and validation of a scanned proton beam model for dose distribution verification using Monte Carlo, Thesis for Master of Science in Medical Radiation Physics. (2015) 48–49.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Durante M., Loeffler J. S.** Charged particles in radiation oncology // *Nature Reviews Clinical Oncology*. 2010. Vol. 7. No. 1. Pp. 37–43.

2. Particle therapy co-operative group (PTCOG). An organization for those uninterested in proton, light ion and heavy charged particle radiotherapy. URL: <https://www.ptcog.ch/>. Accessed: 2019-10-10.

3. **Kozłowska W. S., Böhlen T. T., Cuccagna C., Ferrari A., Fracchiolla F., Magro G., Mairani A., Schwarz M., Vlachoudis V., Georg D.** LUKA particle therapy tool for Monte Carlo independent calculation of scanned proton and carbon ion beam therapy // *Physics in Medicine & Biology*. 2019. Vol. 64. No. 7. P. 075012.

4. **Schardt D., Elsässer T., Schulz-Ertner D.** Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits // *Review of the Modern Physics*. 2010. Vol. 82. No. 1. Pp. 383–425.

5. **Senirkentli G. B., Ekinçi F., Bostancı E., Güzel M. S., Dağlı Ö., Karim A. M., Mishra A.** Proton therapy for mandibula plate phantom // *Healthcare*. 2021. Vol. 9. No. 2. P. 167.
6. **Ekinçi F., Bostancı E., Dağlı Ö., Güzel M. S.** Analysis of Bragg curve parameters and lateral straggle for proton and carbon beam // *Communications Faculty of Sciences University of Ankara. Ser. A2–A3*. 2021. Vol. 63. No. 1. Pp. 32–41.
7. **Chacon A., Safavi-Naevini M., Bolst D., et al.** Monte Carlo investigation of the characteristics of radioactive beams for heavy ion therapy // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. No. 1. P. 6537.
8. **Hong L., Goitein M., Bucciolini M., Comiskey R., Gottschalk B., Rosenthal S., Serago C., Urie M.** A pencil beam algorithm for proton dose calculations // *Physics in Medicine & Biology*. 1996. Vol. 41. No. 8. Pp. 1305–1330.
9. **Rogers D. W. O.** Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics // *Physics in Medicine & Biology*. 2006. Vol. 51. No. 13. Pp. R287–R301.
10. **Baiocco G., Barbieri S., Babini G., et al.** The origin of neutron biological effectiveness as a function of energy // *Scientific Reports*. 2016. Vol. 6. September. P. 34033.
11. **Kajimoto T., Tanaka K., Endo S., Kamada S., Tanaka H., Takada M., Hamano T.** Double differential cross sections of neutron production by 135 and 180 MeV protons on A-150 tissue-equivalent plastic // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2021. Vol. 487. 15 January. Pp. 38–44.
12. **Kurosu K., Das I. J., Moskvın V. P.** Optimization of GATE and PHITS Monte Carlo code parameters for spot scanning proton beam based on simulation with FLUKA general-purpose code // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2016. Vol. 367. 15 January. Pp. 14–25.
13. **Lund C. M., Famulari G., Montgomery L., Kildea J.** A microdosimetric analysis of the interactions of mono energetic neutrons with human tissue // *Physica Medica*. 2020. Vol. 73. May. Pp. 29–42.
14. **Ekinçi F., Bölükdemir M. H.** The effect of the second peak formed in biomaterials used in a slab head phantom on the proton Bragg peak // *Journal of Polytechnic*. 2019. Vol. 23. No. 1. Pp. 129–136.
15. **Augusto R. S., Bauer J., Bouhali O., et al.** An overview of recent developments in FLUKA PET TOOLS // *Physica Medica*. 2018. Vol. 54. October. Pp. 189–199.
16. **Titt U., Bednarz B., Paganetti H.** Comparison of MCNPX and Geant4 proton energy deposition predictions for clinical use // *Physics in Medicine and Biology*. 2012. Vol. 57. No. 20. Pp. 6381–6393.
17. **Wu J.-C., Feng Q.-J., Liu X.-K., Zhan C.-Y., Zou Y., Liu Y.-G.** A combination method for simulation of secondary knock-on atoms of boron carbide induced by neutron irradiation in SPRR-300 // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2016. Vol. 368. 1 February. Pp. 1–4.
18. **Ogilvy C. S., Stieg Ph. E., Awad I., et al.** Recommendations for the management of intracranial arteriovenous malformations // *Stroke*. 2001. Vol. 32. No. 6. Pp. 1458–1471.
19. **Shaller C., Schramm J., Huan D.** Significance of factors contributing to surgical complications and to late outcome after elective surgery of cerebral arteriovenous malformations // *Journal of Neurology, Neurosurgery & Psychiatry*. 1998. Vol. 65. No. 4. Pp. 547–554.
20. **Ogilvy C. S.** Radiation therapy for arteriovenous malformations: a review // *Neurosurgery*. 1990. Vol. 26. No. 5. Pp. 725–735.
21. Geant4. URL: <http://www.geant4.org/geant4/>, Son Erişim Tarihi: 20.04.2016.
22. **Jafar J. J., Davis A. J., Berenstein A., Choi I. S., Kupersmith M. J.** The effect of embolization with N-butyl cyanoacrylate prior to surgical resection of cerebral arteriovenous malformations // *Journal of Neurosurgery*. 1993. Vol. 78. No. 1. Pp. 60–69.
23. **Behrens R., Hupe O.** Influence of the phantom shape (slab, cylinder or Alderson) on the performance of an Hp(3) eye dosimeter // *Radiation Protection Dosimetry*. 2015. Vol. 168. No. 4. Pp. 441–449.
24. **Van Rooij W. J., Sluzewski M., Beute G. N.** Brain AVM embolization with Onyx // *American Journal of Neuroradiology*. 2007. Vol. 28. No. 1. Pp. 172–178.
25. **Ziegler J. F.** SRIM – The stopping and range of ion in matter (2007). URL: <https://www.srim.org/> Accessed: 20.09.2019.
26. ICRU-1992. Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues. Report 46 of The International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU). USA: US Department of Commerce. National Bureau of Standards, 1992.
27. Центр протонной терапии Ринекера в г. Мюнхене, Германия – Rinecker Proton Therapy Center (RPTC). URL: <https://www.rptc.de/en/home.html>. Son Ulaşım: 20 Aralık 2017.



28. **Battistoni G., Cerutti F., Fassò A., Ferrari A., Muraro S., Ranft J., Roester S., Sala P. R.** The FLUKA code: description and benchmarking // AIP Conference Proceedings. 2007. Vol. 896. Hadronic Shower Simulation Workshop, 6–8 September 2006, Batavia, Illinois (USA) Pp. 31–49.
29. **Mairani A.** Nucleus-nucleus interaction modelling and applications in ion therapy treatment planning. PhD Thesis. Pavia, Italy: University of Pavia, 2017. 111 p.
30. **Böhlen T. T., Cerutti F., Chin M. P. W., Fassò A., Ferrari A., Ortega P. G., Mairani A., Sala P. R., Smirnov G., Vlachoudis V.** The FLUKA code: Developments and challenges for high energy and medical applications // Nuclear Data Sheets. 2014. Vol. 120. June. Pp. 211–214.
31. **Dudouet J., Cussol D., Durand D., Labalme M.** Benchmarking GEANT4 nuclear models for hadron therapy with 95 MeV/nucleon carbon ions // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 89. No. 5. P. 054616.
32. **Aricò G., Gehrke T., Gallas R., Mairani A., Jäkel O., Martišíková M.** Investigation of single carbon ion fragmentation in water and PMMA for hadron therapy // Physics in Medicine & Biology. 2019. Vol. 64. No. 5. P. 055018.
33. **Verona C., Cirrone G. A. P., Magrin G., Marinelli M., Palomba S., Petringa G., Rinati G. V.** Microdosimetric measurements of a monoenergetic and modulated Bragg peaks of 62 MeV therapeutic proton beam with a synthetic single crystal diamond microdosimeter // Medical Physics. 2020. Vol. 47. No. 11. Pp. 5791–5801.
34. **Wu Z., Chen S.** Heavy ion, proton and neutron charge deposition analyses in several semiconductor materials // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2018. Vol. 65. No. 8. Pp. 1791–1799.
35. **Du Q., Lin S. T., He H. T., Liu S. K., Tang C. J., Wang L., Wong H. T., Xing H. Y., Yue Q., Zhu J. J.** Response of gadolinium doped liquid scintillator to charged particles: measurement based on intrinsic U/Th contamination // Journal of Instrumentation. 2018. Vol. 13. No. 4. P. P04001.
36. **Mastromarco M., Digennaro A., Mazzone A., Finocchiaro P., Praena J., Porrás I., Colonna N.** Proton boron capture therapy: Dose calculations and a possible new measurement // RAD Conference Proceedings. 2020. Vol. 4. The 8-th International Conference on Radiation in various Fields of Research (virtual). Pp. 185–189.
37. **Yevseyeva O., de Assis J., Yevseev I., Schelin H., Paschuk S., Mihoretto E., Setti J., Díaz K., Hormaza J., Lopes R.** Comparison of GEANT4 simulations with experimental data for thick Al absorbers // AIP Conference Proceedings. 2009. Vol. 1139. Nuclear Physics 2008: XXXI Workshop on Nuclear Physics in Brasil. 8–12 September 2008. São Sebastiao, São Paulo, Brasil. Pp. 97–101.
38. **Liu T. Q., Lic D. Q., Caic C., Zhaoc P. X., Shene C., Liuc J., Yang G. W.** Heavy ion track straggling effect in single event effect numerical simulation of 3D stacked devices // Microelectronics Reliability. 2020. Vol. 114. November. P. 113853.
39. **Zheng Y., Zheng J., Wang X.** Study on the applicability of neutron radiation damage method used for high-temperature superconducting tape based on Geant4 and SRIM // Science and Technology of Nuclear Installation. 2021. 24 November. P. ID 2839746 (9 p.).
40. **Parida M. K., Prabakar K., Prasanna G., Sundari S. T.** Efficiency of boric acid coated semiconductor neutron detector – A GEANT4 simulation study // Proceedings of The 14th IEEE India Council International Conference (INDICON), 15–17 December 2017, India. Report 8487978.
41. **Schwarz M.** Treatment planning in proton therapy // The European Physical Journal Plus. 2011. Vol. 126. No. 7. P. 67.
42. **Jia X., Schümann, J., Paganetti, H., ve Jiang S. B.** GPU-based fast Monte Carlo dose calculation for proton therapy // Physics in Medicine & Biology. 2012. Vol. 57. No. 23. P. 7783.
43. **Yang Z. Y., Tsai P. E., Lee S. C., Liu Y. C., Chen C. C., Sato T., ve Sheu R. J.** Inter-comparison of dose distributions calculated by FLUKA, GEANT4, MCNP, and PHITS for proton therapy // The European Physical Journal. Web of Conferences. 2017. Vol. 153. P. 04011.
44. **Jia S. B., Hadizadeh M. H., Mowlavi A. A., ve Loushab M. E.** Evaluation of energy deposition and secondary particle production in proton therapy of brain using a slab head phantom // Reports of Practical Oncology & Radiotherapy. 2014. Vol. 19. No. 6. Pp. 376–384.
45. **Sterpin E., Sorriaux J., Vynckier S.** Extension of PENELOPE to protons: simulation of nuclear reactions and benchmark with Geant4 // Medical Physics. 2013. Vol. 40. No. 11. P. 111705.
46. **Grimes D. R., Warren D. R., Partridge M.** An approximate analytical solution of the Bethe equation for charged particles in the radiotherapeutic energy range // Scientific Reports. 2017. Vol. 7. No. 1. P. 9781.
47. **Almhagen E.** Development and validation of a scanned proton beam model for dose distribution verification using Monte Carlo. Thesis for Master of Science in Medical Radiation Physics. 2015. Pp. 48–49.

THE AUTHORS

EKINCI Fatih

Gazi University, Physics Department, Besevler, Ankara, Turkey
Emniyet Mahallesi Bandırma Caddesi No: 6/9 06500 Yenimahalle/ANKARA
fatih.ekinci2@gazi.edu.tr
ORCID: 0000-0002-1011-1105

BOSTANCI Erkan

Ankara University, Computer Engineering Department, Golbasi, Ankara, Turkey
ebostanci@ankara.edu.tr
ORCID: 0000-0001-8547-7569

GÜZEL Mehmet Serdar

Ankara University, Computer Engineering Department, Golbasi, Ankara, Turkey
mguzel@ankara.edu.tr
ORCID: 0000-0002-3408-0083

DAĞLI Özlem

Gazi University, Faculty of Medicine, Department of Neurosurgery Gamma Knife Unit, Ankara, Turkey
ozlemdagli@gazi.edu.tr
ORCID: 0000-0003-3798-8342

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЭКИНДЖИ Фатих – доктор наук, профессор кафедры физики, факультета коммуникаций Университета Гази, Бешевлер, г. Анкара, Турция.

Emniyet Mahallesi Bandırma Caddesi No: 6/9 06500 Yenimahalle/ANKARA
fatih.ekinci2@gazi.edu.tr
ORCID: 0000-0002-1011-1105

БОСТАНДЖИ Гази Эркан – кандидат наук, доцент кафедры вычислительной техники Университета Анкары, Гельбаши, г. Анкара, Турция.

ebostanci@ankara.edu.tr
ORCID: 0000-0001-8547-7569

ГУЗЕЛЬ Мехмет Сердар – кандидат наук, доцент кафедры вычислительной техники Университета Анкары, Гельбаши, г. Анкара, Турция.

mguzel@ankara.edu.tr
ORCID: 0000-0002-3408-0083

ДАГЛИ Озлем – сотрудница кафедры стереотоксической радиохирургии головного мозга медицинского факультета Университета Гази, г. Анкара, Турция.

ozlemdagli@gazi.edu.tr
ORCID: 0000-0003-3798-8342

Received 01.03.2022. Approved after reviewing 25.04.2022. Accepted 25.04.2022.

Статья поступила в редакцию 01.03.2022. Одобрена после рецензирования 25.04.2022. Принята 25.04.2022.

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15208>

RECONSTRUCTING QUINTESSENCE SCALAR FIELD MODEL FROM NEW HOLOGRAPHIC DARK ENERGY IN BIANCHI TYPE I UNIVERSE

C. R. Mahanta, M. P. Das [✉],

Gauhati University, India

[✉] manashpratimdas22222@gmail.com

Abstract. In this paper, we investigate the cosmic evolution of a spatially homogeneous and anisotropic Bianchi type I universe filled with new holographic dark energy (NHDE) and cold dark matter (CDM) within the framework of General Relativity by considering both the components of the universe to be interacting with each other. To obtain the exact solutions of Einstein's field equations, we consider two expansion laws: an exponential expansion and a power-law volumetric expansion. The evolutions of some parameters of cosmological importance are studied for both the models corresponding to the exponential expansion and the power-law volumetric expansion. We observe that in both the models the anisotropy parameter decreases as time evolves and tends to zero at late times. The model corresponding to exponential expansion behaves like CDM model and the model corresponding to power-law volumetric expansion behaves like quintessence holographic dark energy model at late time. We also compare the equation of state (EoS) and energy density of our interacting NHDE model with that of quintessence scalar field and establish a correspondence between them. The quintessence potential is reconstructed which depicts the observed accelerated expansion of the universe.

Keywords: Bianchi type I universe, new holographic dark energy, quintessence, EoS parameter

For citation: Mahanta C. R., Das M. P. Reconstructing quintessence scalar field model from new holographic dark energy in Bianchi type I universe, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 79–92. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15208>

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

Научная статья

УДК 530.12:517.988

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15208>

РЕКОНСТРУКЦИЯ МОДЕЛИ СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ КВИНТЭССЕНЦИИ ДЛЯ НОВОЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕМНОЙ ЭНЕРГИИ ВО ВСЕЛЕННОЙ БИАНКИ ТИПА I

Ч. Р. Маханта, М. П. Дас [✉]

Университет Гаухати, г. Гаухати, Индия

[✉] manashpratimdas22222@gmail.com

Аннотация. В рамках общей теории относительности в работе исследована космическая эволюция однородной по пространству и анизотропной Вселенной Бианки типа I, заполненной новой голографической темной энергией (НГТЭ) и холодной темной

материей (ХТМ); при этом сделано предположение, что оба компонента Вселенной взаимодействуют между собой. Чтобы получить точные решения полевых уравнений Эйнштейна, рассмотрены два закона расширения: экспоненциальное и степенное объемное. Для обоих случаев изучено изменение некоторых ключевых космологических параметров. Установлено, что для обеих моделей анизотропный параметр уменьшается со временем и в итоге стремится к нулю. Оказалось, что модель, соответствующая экспоненциальному расширению, ведет себя как модель ХТМ, а модель, соответствующая степенному объемному расширению, – как модель ГТЭ позднего периода. Проведено также сравнение уравнения состояния и плотности энергии взаимодействия в НТГЭ (наша модель) и в модели скалярного поля квинтэссенции и найдено соответствие между ними. Потенциал квинтэссенции реконструирован таким образом, чтобы он описывал наблюдаемое ускоренное расширение Вселенной.

Ключевые слова: Вселенная Бианки типа I, новая голографическая темная энергия, квинтэссенция, уравнение состояния

Для цитирования: Маханта Ч. Р., Дас М. П. Реконструкция модели скалярного поля квинтэссенции для новой голографической модели темной энергии во Вселенной Бианки типа I // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 79–92. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15208>

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

1. Introduction

Until the late 20th century, no consensus has been reached about the expansion rate of the universe. However, various cosmological and astrophysical observations such as Supernovae Type Ia (SN Ia) [1 – 3], Cosmic Microwave Background (CMB) [4, 8], Baryon Acoustic Oscillations (BAO) [9], Large Scale Structure (LSS) [10 – 12] and their cross relations make it clear that our universe is currently undergoing a phase of accelerated expansion. A strange kind of physical entity is supposed to be the cause of this late time cosmic acceleration which is termed as dark energy.

A dark energy candidate which can simply explain the late time cosmic acceleration is the so called cosmological constant Λ introduced by Einstein in his field equations. However, due to its non-evolving nature, it suffers from some theoretical challenges such as the fine-tuning and the cosmic coincidence problems. Therefore, quintessence [13 – 15], a minimally coupled homogeneous scalar field which provides a solution to the fine-tuning problem and also to the coincidence problem by means of tracker solutions, is considered as dark energy candidate. Different dynamical dark energy models such as phantom [16], k -essence [17], tachyon [18], dilatonic ghost condensate [19] and the interacting exotic fluid models such as Chaplygin gas models [20 – 23] etc. have also been investigated in the literature.

Holographic dark energy is another candidate of considerable interest which emerges from the Holographic Principle, first put forwarded by Gerard 't Hooft [24] in the context of black hole physics. This principle states that the number of degrees of freedom directly related to the entropy of a system scales with the enclosing surface area of the system and not with its volume. Based on the effective Quantum Field Theory, Cohen et al. [25] proposed a relationship between the ultraviolet (UV) cutoff and the infrared (IR) cutoff of a system due to the limit set by the formation of a black hole which in turn gives an upper bound on the zero-point energy of a system. When the whole universe is taken into account, this zero-point energy density has the same order of magnitude as the dark energy density which is referred to as the holographic dark energy.

In the cosmological context, a new version of the Holographic Principle was first proposed by Fischler and Susskind [26] which states that at any point during cosmological evolution the gravitational entropy within a closed surface should not exceed the particle entropy that passes through the past light-cone of that surface. Granda and Oliveros [27] proposed a new holographic dark energy density of the form



$$\rho_{\text{NHDE}} \approx \alpha H^2 + \beta \dot{H},$$

where H is the Hubble parameter, and the two constants α and β are to be determined so as to satisfy the restrictions entailed by the current observational data.

In Ref. [27], they showed that this new dark energy model can explain the current cosmic acceleration and being consistent with the observational data. In Ref. [28], these authors also established correspondence between quintessence, tachyon, k -essence and dilaton dark energy models with this new holographic dark energy in the flat Friedman – Robertson – Walker (FRW) universe. Many other researchers have since investigated several aspects of new holographic dark energy (NHDE) in an isotropic as well as in anisotropic background and studied the correspondence between the scalar fields such as quintessence, k -essence and NHDE models in cosmology [28 – 46].

The goal of this paper is to investigate a spatially homogeneous and anisotropic Bianchi type I universe filled with interacting cold dark matter and new holographic dark energy within the framework of General Relativity.

The reason why an anisotropic universe is considered in our investigation is that although our universe is homogeneous and isotropic at large scale, recent experimental tests like Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) [7, 8], Cosmic Background Explorers (COBE) [47] and Planck Collaboration results [48] support the existence of an anisotropic phase in the evolution of the universe that approaches an isotropic one.

The paper is organized as follows: In Section 2, we derive the field equations for the Bianchi type I line-element and find the expression for the equation-of-state (EoS) parameter for interacting cold dark matter and new holographic dark energy. In Section 3, we solve the Einstein field equations by considering two expansion laws viz. an exponential expansion and a volumetric expansion law. We construct two different models corresponding to these two expansion laws. In this section, we also obtain the expressions for some parameters of cosmological interest and discuss some physical and geometrical properties of both the models. In Section 4, we establish the correspondence between the quintessence and the new holographic dark energy for the model with volumetric expansion law. We conclude the paper with a brief discussion in Section 5.

2. Metric and field equations

A spatially homogeneous and anisotropic Bianchi type I universe is described by the line-element

$$ds^2 = -dt^2 + A^2 dx^2 + B^2 dy^2 + C^2 dz^2, \quad (1)$$

where A, B, C are functions of the cosmic time t alone.

We assume that the universe is filled with two interacting components: cold dark matter (CDM) and new holographic dark energy (NHDE).

In natural units ($8\pi G=1, c=1$), Einstein's field equations are

$$R_{ij} - \frac{1}{2} g_{ij} R = -(T_{ij} + \bar{T}_{ij}), \quad (2)$$

where R_{ij} is the Ricci tensor; R is the Ricci scalar; T_{ij} is the energy-momentum tensor for cold dark matter given by

$$T_{ij} = \rho_m u_i u_j, \quad (3)$$

and \bar{T}_{ij} is the energy-momentum tensor for new holographic dark energy given by

$$\bar{T}_{ij} = (\rho_{\text{NHDE}} + p_{\text{NHDE}}) u_i u_j + g_{ij} p_{\text{NHDE}}. \quad (4)$$

Here, ρ_m is the energy density of cold dark matter, ρ_{NHDE} and p_{NHDE} are respectively the energy density and the pressure of the new holographic dark energy.

In a comoving coordinate system, Eq. (2) with Eqs. (3) and (4) for the metric (1) lead to the following system of field equations:

$$\frac{\ddot{B}}{B} + \frac{\ddot{C}}{C} + \frac{\dot{B}\dot{C}}{BC} = -p_{\text{NHDE}}, \quad (5)$$

$$\frac{\ddot{C}}{C} + \frac{\ddot{A}}{A} + \frac{\dot{C}\dot{A}}{CA} = -p_{\text{NHDE}}, \quad (6)$$

$$\frac{\ddot{A}}{A} + \frac{\ddot{B}}{B} + \frac{\dot{A}\dot{B}}{AB} = -p_{\text{NHDE}}, \quad (7)$$

$$\frac{\dot{A}\dot{B}}{AB} + \frac{\dot{B}\dot{C}}{BC} + \frac{\dot{C}\dot{A}}{CA} = \rho_m + p_{\text{NHDE}}, \quad (8)$$

where an over dot denotes differentiation with respect to t .

Following Ref. [27], we consider the new holographic dark energy density as

$$\rho_{\text{NHDE}} = 3M_p^2(\alpha H^2 + \beta \dot{H}), \quad (9)$$

where $M_p^{-2} = 8\pi G = 1$; α, β are constants.

The pressure of the NHDE is given by

$$p_{\text{NHDE}} = \omega_{\text{NHDE}}\rho_{\text{NHDE}}, \quad (10)$$

where ω_{NHDE} is the EoS parameter of NHDE.

In a universe where dark matter and dark energy are interacting with each other, their energy densities do not conserve separately. So, when CDM and NHDE are interacting the continuity equations can be obtained as

$$\dot{\rho}_m + 3H\rho_m = Q, \quad (11)$$

$$\dot{\rho}_{\text{NHDE}} + 3H(\rho_{\text{NHDE}} + p_{\text{NHDE}}) = -Q, \quad (12)$$

where Q represents the interaction term between CDM and NHDE.

A natural choice for the interaction term available in the literature is $Q \propto H\rho_m$, $Q \propto H\rho_{\text{NHDE}}$ or a combination of these. We take

$$Q = 3H(\gamma\rho_{\text{NHDE}} + \delta\rho_m), \quad (13)$$

where γ, δ are coupling constants.

For $\gamma = 0$, we have $Q = 3H\delta\rho_m$, and for $\delta = 0$, we have $Q = 3H\gamma\rho_{\text{NHDE}}$. CDM and NHDE are non-interacting for $\gamma = 0 = \delta$.

From Eqs. (9), (10), (12) and (13), we obtain

$$\omega_{\text{NHDE}} = -1 - \frac{2\alpha H\dot{H} + \beta\ddot{H}}{3H(\alpha H^2 + \beta\dot{H})} - \left(\gamma + \frac{\delta\rho_m}{\rho_{\text{NHDE}}} \right). \quad (14)$$

3. Solutions of the field equations

From Eqs. (5) – (8), we derive

$$A(t) = a_1 V^{\frac{1}{3}} \exp(b_1 \int V^{-1} dt), \quad (15)$$

$$B(t) = a_2 V^{\frac{1}{3}} \exp(b_2 \int V^{-1} dt), \quad (16)$$

$$C(t) = a_3 V^{\frac{1}{3}} \exp(b_3 \int V^{-1} dt), \quad (17)$$

where $a_1 a_2 a_3 = 1$, $b_1 + b_2 + b_3 = 0$, and $V = ABC$ is the volume of the universe.

Now, as we have four equations in five unknown parameters A, B, C, ρ_m and p_{NHDE} , therefore,



we need one extra condition to obtain an exact solution of the field equations. In view of Eqs. (15) – (17), we consider an exponential expansion law given by

$$V = ce^{3lt}, \quad (18)$$

and also a volumetric expansion law given by

$$V = ct^{3n}, \quad (19)$$

where c, l, n are positive constants.

A model for exponential expansion (Model 1). Using (18) in Eqs. (15) – (17), we get

$$A = a_1 c^{\frac{1}{3}} e^{lt} \exp\left[-\frac{b_1}{3cl} e^{-3lt}\right], \quad (20)$$

$$B = a_2 c^{\frac{1}{3}} e^{lt} \exp\left[-\frac{b_2}{3cl} e^{-3lt}\right], \quad (21)$$

$$C = a_3 c^{\frac{1}{3}} e^{lt} \exp\left[-\frac{b_3}{3cl} e^{-3lt}\right]. \quad (22)$$

For this model, the directional Hubble parameters H_i and the mean Hubble parameter H are obtained as

$$H_1 = \frac{\dot{A}}{A} = l + \frac{b_1}{c} e^{-3lt}, \quad (23)$$

$$H_2 = \frac{\dot{B}}{B} = l + \frac{b_2}{c} e^{-3lt}, \quad (24)$$

$$H_3 = \frac{\dot{C}}{C} = l + \frac{b_3}{c} e^{-3lt}, \quad (25)$$

$$H = l. \quad (26)$$

The scalar of expansion θ , the spatial volume V , the shear scalar σ^2 , the deceleration parameter q and the anisotropy parameter A_m for this model are obtained as

$$\theta = 3l, \quad (27)$$

$$\sigma^2 = \frac{M}{2c^2} e^{-6lt}, \quad (28)$$

$$q = -1, \quad (29)$$

$$A_m = \frac{M}{3l^2 c^2} e^{-6lt}, \quad (30)$$

where $M = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2$.

From Eq. (9) we obtain

$$\rho_{\text{NHDE}} = 3\alpha l^2, \quad (31)$$

and from Eq. (11), using Eqs. (13) and (26), we get

$$\rho_m = \frac{3\alpha\gamma l^2}{1-\delta} + d e^{-3lt(1-\delta)}, \quad (32)$$

where d is an integrating constant and $\delta \neq 1$.

Therefore, for this model, the total energy density and the EoS parameter are given by

$$\Omega = \Omega_{\text{NHDE}} + \Omega_m = \frac{\rho_{\text{NHDE}}}{3H^2} + \frac{\rho_m}{3H^2} = \alpha + \frac{\alpha\gamma}{1-\delta} + \frac{de^{-3lt(1-\delta)}}{3l^2}, \quad (33)$$

$$\omega_{\text{NHDE}} = -1 - \gamma - \delta \left(\frac{\gamma}{1-\delta} + \frac{de^{-3lt(1-\delta)}}{3\alpha l^2} \right), \quad (34)$$

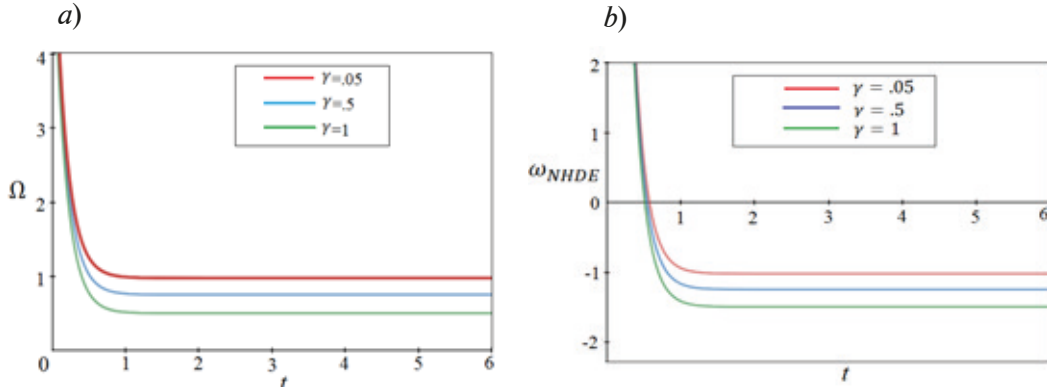


Fig. 1. Graphs of the total energy density Ω (a) and the EoS parameter (b) vs cosmic time t at different γ : 0.05 (red lines), 0.5 (blue ones) and 1.0 (green ones); $\alpha = 1, \delta = -1, d = 100, l = 1$

It is evident from the graphs in Fig. 1, that for small values of γ , our model approaches a flat isotropic universe in the course of time and behaves like a Λ CDM model. However, the model does not represent a flat isotropic universe for $\delta = 0$ and sufficiently large values of γ .

A model for volumetric expansion law (Model 2). Using Eq. (19) in Eqs. (15) – (17), we obtain

$$A(t) = a_1 c^{\frac{1}{3}} t^n \exp \left[\frac{b_1}{c(1-3n)} t^{-3n+1} \right], \quad (35)$$

$$B(t) = a_2 c^{\frac{1}{3}} t^n \exp \left[\frac{b_2}{c(1-3n)} t^{-3n+1} \right], \quad (36)$$

$$C(t) = a_3 c^{\frac{1}{3}} t^n \exp \left[\frac{b_3}{c(1-3n)} t^{-3n+1} \right], \quad (37)$$

where $n \neq 1/3$.

The directional Hubble parameters H_i and the mean Hubble parameter H for this model are obtained as

$$H_1 = nt^{-1} + \frac{b_1}{c} t^{-3n}, \quad (38)$$

$$H_2 = nt^{-1} + \frac{b_2}{c} t^{-3n}, \quad (39)$$

$$H_3 = nt^{-1} + \frac{b_3}{c} t^{-3n}, \quad (40)$$

$$H = \frac{n}{t}. \quad (41)$$

The scalar of expansion θ , the spatial volume V , the shear scalar σ^2 , the deceleration parameter q and the anisotropy parameter A_m are obtained as

$$\theta = \frac{3n}{t}, \quad (42)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{2c^2} M t^{-6n}, \quad (43)$$

$$q = -1 + \frac{1}{n}, \quad (44)$$

$$A_m = \frac{1}{3} \frac{M}{c^2 n^2 t^4} \quad (45)$$

where $M = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2$.

The cosmological observations indicate that the value of the deceleration parameter lies in the range $-1 < q < 0$, so it is clear from Eq. (44) that for an accelerating expansion of the universe, we must take $n > 1$. Moreover, Eq. (45) reveals that the anisotropy parameter is a decreasing function of cosmic time and tends to zero in the course of time.

The NHDE density for this model is obtained from Eq. (9), as

$$\rho_{\text{NHDE}} = \frac{3(\alpha n^2 - \beta n)}{t^2}. \quad (46)$$

Using Eqs. (13), (41) and (46) in Eq. (11), we obtain

$$\rho_m = \frac{9n\gamma(\alpha n^2 - \beta n)}{3n(1-\delta)-2} t^{-2} + d t^{-3n(1-\delta)}, \quad (47)$$

where d is an integrating constant.

Therefore, for this model, the total energy density and the EoS parameters are given by

$$\Omega = \Omega_{\text{NHDE}} + \Omega_m = \frac{\rho_{\text{NHDE}}}{3H^2} + \frac{\rho_m}{3H^2} = \alpha - \frac{\beta}{n} + \frac{3\gamma(\alpha n - \beta)}{3n(1-\delta)-2} + \frac{d t^{-3n(1-\delta)-2}}{3n^2}, \quad (48)$$

$$\omega_{\text{NHDE}} = -1 + \frac{2}{3n} - \left\{ \gamma + \delta \left(\frac{3n\gamma}{3n(1-\delta)-2} + \frac{d t^{-3n(1-\delta)-2}}{3(\alpha n^2 - \beta n)} \right) \right\}. \quad (49)$$

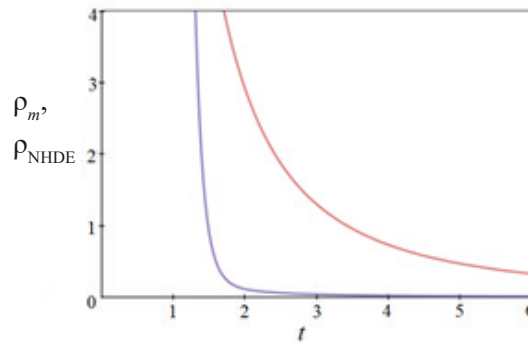


Fig. 2. Graphs of the new holographic dark energy density ρ_{NHDE} (the red line) and the cold dark matter density ρ_m (the blue one) vs cosmic time t ; $d = 100$, $\delta = -1$, $n = 2$, $\alpha = 1$, $\beta = 0.05$, $\gamma = 0.05$

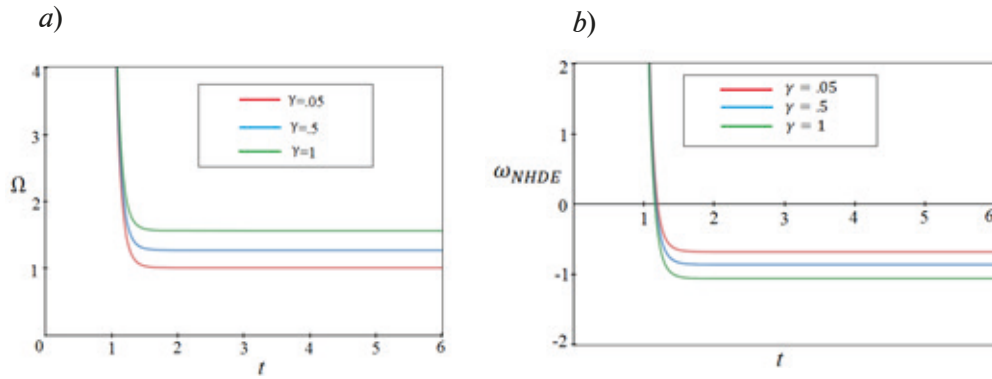


Fig. 3. Graphs of the total energy density Ω (a) and the EoS parameter ω_{NHDE} (b) vs cosmic time t at different γ : 0.05 (red lines), 0.5 (blue ones) and 1.0 (green ones); $n = 2, \alpha = 1, \beta = 0.05, \delta = -1, d = 100$

It is clear from the graphs in Fig. 2 that both the CDM density ρ_m and the NHDE density ρ_{NHDE} are decreasing functions of cosmic time. The former tends to zero as time evolves while the latter is near to zero in the course of time. For $\gamma = 0$ and for sufficiently small values of γ this model approaches a flat universe and the EoS parameter enters into quintessence region $-1 < \omega_{\text{NHDE}} < -1/3$ at a later time (Fig. 3). The same as Model 1, this model fails to represent the current universe for sufficiently large values of γ and for $\delta = 0$.

Hence, to consider the interaction between NHDE and CDM, it suffices to take the coupling parameter δ as the interacting term and $\gamma = 0$. Thus, putting $\gamma = 0$ in Eq. (49), we obtain

$$\omega_{\text{NHDE}} = -1 + \frac{2}{3n} - \delta \frac{dt^{-3n(1-\delta)-2}}{3(\alpha n^2 - \beta n)}. \quad (50)$$

4. Correspondence between new holographic dark energy and quintessence scalar field model

Quintessence is described by an ordinary scalar field ϕ minimally coupled to gravity and self-interaction described by a potential $V(\phi)$ that leads to late time cosmic acceleration.

The action for the quintessence scalar field ϕ is given by an expression

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left[-\frac{1}{2} g^{ij} \partial_i \phi \partial_j \phi - V(\phi) \right]. \quad (51)$$

The energy density and pressure of the scalar field are given by expression

$$\rho(\phi) = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + V(\phi), \quad (52)$$

$$p(\phi) = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 - V(\phi). \quad (53)$$

Using Eqs. (52) and (53), the EoS for the quintessence scalar field is obtained as

$$\omega_\phi = \frac{p(\phi)}{\rho(\phi)} = \frac{\dot{\phi}^2 - 2V(\phi)}{\dot{\phi}^2 + 2V(\phi)}. \quad (54)$$

In order to establish the correspondence between the new holographic dark energy and the quintessence scalar field model, we compare the EoS and the dark energy density for the interacting new holographic dark energy and quintessence dark energy models.



Thus, comparing Eqs. (50) and (54), we obtain

$$-1 + \frac{2}{3n} - \delta \frac{dt^{-3n(1-\delta)-2}}{3(\alpha n^2 - \beta n)} = \frac{\dot{\phi}^2 - 2V(\phi)}{\dot{\phi}^2 + 2V(\phi)}. \quad (55)$$

Also, comparing Eqs. (46) and (52), we obtain

$$\frac{3(\alpha n^2 - \beta n)}{t^2} = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + V(\phi). \quad (56)$$

Again, from Eq. (55), we derive

$$\dot{\phi}^2 = \frac{4(\alpha n - \beta) - 2\delta dt^{-3n(1-\delta)-2}}{6(\alpha n^2 - \beta n) - 2(\alpha n - \beta) + \delta dt^{-3n(1-\delta)-2}} V(\phi). \quad (57)$$

Using Eq. (56) in Eq. (57), we obtain

$$V(\phi) = \frac{3(\alpha n^2 - \beta n)}{t^2} \frac{6(\alpha n^2 - \beta n) - 2(\alpha n - \beta) + \delta dt^{-3n(1-\delta)-2}}{6(\alpha n^2 - \beta n) + 2(\alpha n - \beta) - \delta dt^{-3n(1-\delta)-2}}. \quad (58)$$

This type of potential can produce an accelerated expansion of the universe. Thus a correspondence between the interacting new holographic dark energy and quintessence scalar field model is established.

5. Conclusion

In this work, we study a spatially homogeneous and anisotropic Bianchi type I universe filled with interacting the new holographic dark energy and the cold dark matter by taking the coupling parameter Q as

$$Q = 3H(\gamma\rho_{\text{NHDE}} + \delta\rho_m).$$

To obtain the exact solutions of the Einstein field equations, we consider two expansion laws: an exponential expansion and a power-law volumetric one; they correspond to Models 1 and 2, respectively.

Considering Model 1, we find that the average Hubble parameter and the NHDE density are constant and the deceleration parameter equals -1 . The anisotropy parameter decreases as time evolves and tends to zero at late time. The total energy density for this model approaches 1 for $\gamma \rightarrow 0$. Thus, for small values of γ , this model approaches a flat, isotropic universe at late time and the EoS parameter approaches -1 showing thereby that the Model 1 behaves like a Λ CDM model.

In Model 2, the Hubble parameter, NHDE density and CDM one are decreasing functions of cosmic time. We also observe that the anisotropy parameter decreases as time evolves and tends to zero. Hence, we conclude that the anisotropy of our universe dies out in the course of the evolution to reach the present isotropic phase. It can be also seen from Fig. 3,*a* that the total energy density approaches 1, and from Fig. 3,*b* we see that the EoS parameter of this model lies in the quintessence region

$$-1 < \omega_{\text{NHDE}} < -1/3$$

for $\gamma \rightarrow 0$.

So, this model behaves like a quintessence holographic dark energy model.

In both the models we define the interaction between NHDE and CDM by taking

$$Q = 3H(\gamma\rho_{\text{NHDE}} + \delta\rho_m).$$

But the models represent current universe only for small values of γ . Therefore, we ignore γ while establishing correspondence between the new holographic dark energy model and the quintessence scalar field model. Quintessence potential is reconstructed which describes the accelerated phase of expansion of the universe.

REFERENCES

1. **Riess A. G., Filippenko A. V., Challis P., et al.**, Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant, *Astron. J.* 116 (3) (1998) 1009–1038.
2. **Perlmutter S., Aldering G., Goldhaber G., et al.**, Measurements of Ω and Λ from 42 high-redshift supernovae, *Astrophys. J.* 517 (2) (1999) 565–586.
3. **Perlmutter S., Aldering G., Valle M., et al.**, Discovery of a supernova explosion at half the age of the universe, *Nature.* 391 (6662) (1998) 51–54.
4. **Miller A. D., Caldwell R., Devlin M. J., et al.**, A measurement of the angular power spectrum of the cosmic microwave background from $L = 100$ to 400, *Astrophys. J. Lett.* 524 (1) (1999) L1–L4.
5. **De Bernardis P., Ade P., Bock J., et al.**, A flat universe from high-resolution maps of the cosmic microwave background radiation, *Nature.* 404 (6781) (2002) 955–959.
6. **Halverson N. W., Leitch E. M., Prike C., et al.**, Degree angular scale interferometer first results: A measurement of the cosmic microwave background angular power spectrum, *Astrophys. J.* 568 (1) (2002) 38–45.
7. **Bennett C. L., Halpern M., Hinshaw G., et al.**, First-year Wilkinson microwave anisotropy probe (WMAP)* observations: Preliminary maps and basic results, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 148 (1) (2003) 1–28.
8. **Spergel D. N., Verde L., Peiris H. V., et al.**, First-year Wilkinson microwave anisotropy probe (WMAP)* observations: Determination of cosmological parameters, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 148 (1) (2003) 175–194.
9. **Bassett B., Hlozek R.**, Baryon acoustic oscillations, In book: “Dark energy: Observational and theoretical approaches”. Ed. by P. Ruiz-Lapuente, Cambridge University Press, Cambridge (2010) 246–278.
10. **Hawkins E., Maddox S., Cole S., et al.**, The 2dF galaxy redshift survey: correlation functions, peculiar velocities and the matter density of the universe, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 346 (1) (2003) 78–96.
11. **Abazajian K., Adelman-McCarthy J. K., Agueros M. A., et al.**, The second data release of the Sloan Digital Sky Survey, *Astron. J.* 128 (1) (2004) 502–512.
12. **Verde L., Heavens A. F., Persival W. J., et al.**, The 2dF galaxy redshift survey: the bias of galaxies and the density of the universe, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 335 (2) (2002) 432–440.
13. **Wetterich C.**, Cosmology and the fate of dilatation symmetry, *Nucl. Phys. B.* 302 (4) (1988) 668–696.
14. **Padmanabhan T.**, Dark energy and gravity, *Gen. Relativ. Gravit.* 40 (2–3) (2008) 529–564.
15. **Sahni V., Starobinsky A.**, The case for a positive cosmological Λ -term, *Int. J. Mod. Phys. D.* 9 (4) (2000) 373–443.
16. **Caldwell R. R.**, A phantom menace? Cosmological consequences of a dark energy component with super-negative equation of state, *Phys. Lett. B.* 545 (1–2) (2002) 23–29.
17. **Armendariz-Picon C., Mukhanov V., Steinhardt P. J.**, Essentials of k -essence, *Phys. Rev. D.* 63 (10) (2001) 103510.
18. **Sen A.**, Tachyon matter, *J. High Energy Phys.* 2002 (July) (2002), 07(2002)065. (arXiv:hep-th/0203265).
19. **Gasperini M., Piazza F., Veneziano G.**, Quintessence as a runaway dilaton, *Phys. Rev. D.* 65 (2) (2002) 023508.
20. **Srivastava S. K.**, Future universe with $w < -1$ without big smash, *Phys. Lett. B.* 619 (1–2) (2005) 1–4.



21. **Bertolami O., Sen A. A., Sen S., Silva P. T.**, Latest supernova data in the framework of the generalized Chaplygin gas model, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 353 (1) (2004) 329–337.
22. **Bento M. C., Bertolami O., Sen A. A.**, Generalized Chaplygin gas, accelerated expansion, and dark-energy-matter unification, *Phys. Rev. D.* 66 (4) (2002) 043507.
23. **Kamenshchik A., Moschella U., Pasquier V.**, An alternative to quintessence, *Phys. Lett. B.* 511 (2–4) (2001) 265–268.
24. **t' Hooft G.**, Dimensional reduction in quantum gravity, *Proc. Conf. on Highlights of Particle and Condensed Matter Physics (SALAMEST)*, 8 – 12 March 1993, Trieste, Italy; Report No. THU-93-26. *Conf. Proc. C 930308* (1993) 284 – 296.
25. **Cohen A. G., Kaplan D. B., Nelson A. E.**, Effective field theory, black holes, and the cosmological constant, *Phys. Rev. Lett.* 82 (25) (1999) 4971–4974.
26. **Fischler W., Susskind L.**, Holography and cosmology, *J. High Energy Phys.* (June) (1998) arXiv: hep-th/9806039 (1998).
27. **Granda L. N., Oliveros A.**, Infrared cut-off proposal for the holographic density, *Phys. Lett. B.* 669 (5) (2008) 275–277.
28. **Granda L. N., Oliveros A.**, New infrared cut-off for the holographic scalar fields models of dark energy, *Phys. Lett. B.* 671 (2) (2009) 199–202.
29. **Chattopadhyay S., Debnath U.**, Holographic dark energy scenario and variable modified Chaplygin gas, *Astrophys. Space Sci.* 319 (2–4) (2009) 183–185.
30. **Farajollahi H., Sadeghi J., Pourali M.**, Stability analysis of holographic dark energy in Brans – Dicke cosmology, *Astrophys. Space Sci.* 341 (2) (2012) 695–700.
31. **Karami K., Fehri J.**, New holographic scalar field models of dark energy in non-flat universe, *Phys. Lett. B.* 684 (2–3) (2010) 61–68.
32. **Malekjani M.**, Generalized holographic dark energy model in the Hubble length, *Space Sci.* 347 (2) (2013) 405–410.
33. **Rao V. U. M., Santhi M. V., Aditya Y.**, Anisotropic Bianchi type- VI_h perfect fluid cosmological models in a modified theory of gravity, *Prepacetime J.* 6 (10) (2015) 947–960.
34. **Guberina B., Horvat R., Nikolić H.**, Generalized holographic dark energy and the IR cutoff problem, *Phys. Rev. D.* 72 (12) (2005) 125011.
35. **Mete V. G., Murade P. B., Bansod A. S.**, LRS Bianchi type I universe filled with interacting cold dark matter and holographic dark energy, *African Rev. Phys.* 12 (0017) (2017) 125–129.
36. **Ghaffari S.**, Holographic dark energy model in the DGP brane world with time varying holographic parameter, *New Astronomy.* 2019. Vol. 67 (February) (2019) 76–84.
37. **Rahman M. A., Ansari M.**, Interacting holographic polytropic gas model of dark energy with hybrid expansion law in Bianchi type- VI_0 space-time, *Astrophys. Space Sci.* 354 (2) (2014) 617–625.
38. **Saridakis N. E.**, Ricci – Gauss – Bonnet holographic dark energy, *Phys. Rev. D.* 97 (6) (2018) 064035.
39. **Srivastava S., Sharma U. K., Pradhan A.**, New holographic dark energy in Bianchi-III universe with k -essence, *New Astronomy.* 68 (April) (2019) 57–64.
40. **Katore S. D., Kapse D. V.**, Dynamics of Bianchi type VI_0 holographic dark energy models in general relativity and Lira's geometry, *Pramana – J. Phys.* 88 (2) (2017) ID0030.
41. **Samanta G. C., Dhal S. N.**, Higher dimensional cosmological model filled with perfect fluid in $f(R, T)$ theory of gravity, *Int. J. Theor. Phys.* 52 (4) (2013) 1334–1344.
42. **Santhi M. V., Rao V. U. M., Gusu D. M., Aditya Y.**, Bianchi type-III holographic dark energy model with quintessence, *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 15 (9) (2018) 1850161.
43. **Gusu D. M., Santhi M. V.**, Analysis of Bianchi type V holographic dark energy models in general relativity and Lira's geometry, *Adv. High Energy Phys.* 2021 (January) (2021) ID 8818590.
44. **Kim R. G., Ri Ch. H.**, Generalized holographic dark energy and cosmic coincidence, *New Astronomy.* 84 (April) (2021) 101540.
45. **Pourojaghi S., Malekjani M.**, A new comparison between holographic dark energy and standard Λ -cosmology in the context of cosmography method, *Eur. Phys. J. C.* 81 (7) (2021) 575.
46. **Shaikh A. Y., Wankhade K. S.** Panorama behaviors of holographic dark energy models in modified gravity, *Found Phys.* 51 (3) (2021) 58.
47. **Smoot G. F., Bennett C. L., Kogyt A., et al.**, Structure in the COBE differential microwave radiometer first-year maps, *Astrophys. J.* 396 (September) (1992) L1–L5.
48. **Ade P. A. R., Aghanim N., Acrami Y., et al.** (Planck collaboration), Isotropy and statistics of the

CMB, Planck 2015 results, *Astron. & Astrophys.* 594 (October) (2016) A16 (62 p.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Riess A. G., Fillipenko A. V., Challis P., et al.** Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant // *The Astronomical Journal*. 1998. Vol. 116. No. 3. Pp. 1009–1038.
2. **Perlmutter S., Aldering G., Goldhaber G., et al.** Measurements of Ω and Λ from 42 high-redshift supernovae // *The Astrophysical Journal*. 1999. Vol. 517. No. 2. Pp. 565–586.
3. **Perlmutter S., Aldering G., Valle M., et al.** Discovery of a supernova explosion at half the age of the universe // *Nature*. 1998. Vol. 391. No. 6662. Pp. 51–54.
4. **Miller A. D., Caldwell R., Devlin M. J., et al.** A measurement of the angular power spectrum of the cosmic microwave background from $L = 100$ to 400 // *The Astrophysical Journal Letters*. 1999. Vol. 524. No. 1. Pp. L1–L4.
5. **De Bernardis P., Ade P., Bock J., et al.** A flat universe from high-resolution maps of the cosmic microwave background radiation // *Nature*. 2002. Vol. 404. No. 6781. Pp. 955–959.
6. **Halverson N. W., Leitch E. M., Prike C., et al.** Degree angular scale interferometer first results: A measurement of the cosmic microwave background angular power spectrum // *The Astrophysical Journal*. 2002. Vol. 568. No. 1. Pp. 38–45.
7. **Bennett C. L., Halpern M., Hinshaw G., et al.** First-year Wilkinson microwave anisotropy probe (WMAP)* observations: Preliminary maps and basic results // *The Astrophysical Journal. Supplementary Series*. 2003. Vol. 148. No. 1. Pp. 1–28.
8. **Spergel D. N., Verde L., Peiris H. V., et al.** First-year Wilkinson microwave anisotropy probe (WMAP)* observations: Determination of cosmological parameters // *The Astrophysical Journal. Suppl. Ser.* 2003. Vol. 148. No. 1. Pp. 175–194.
9. **Bassett B., Hlozek R.** Baryon acoustic oscillations // *Dark energy: Observational and theoretical approaches*. Edited by P. Ruiz-Lapuente. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. Pp. 246–278.
10. **Hawkins E., Maddox S., Cole S., et al.** The 2dF galaxy redshift survey: correlation functions, peculiar velocities and the matter density of the universe // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2003. Vol. 346. No. 1. Pp. 78–96.
11. **Abazajian K., Adelman-McCarthy J. K., Agueros M. A., et al.** The second data release of the Sloan Digital Sky Survey // *The Astronomical Journal*. 2004. Vol. 128. No. 1. Pp. 502–512.
12. **Verde L., Heavens A. F., Persival W. J., et al.** The 2dF galaxy redshift survey: the bias of galaxies and the density of the universe // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2002. Vol. 335. No. 2. Pp. 432–440.
13. **Wetterich C.** Cosmology and the fate of dilatation symmetry // *Nuclear Physics B*. 1988. Vol. 302. No. 4. Pp. 668–696.
14. **Padmanabhan T.** Dark energy and gravity // *General Relativity and Gravitation*. 2008. Vol. 40. No. 2–3. Pp. 529–564.
15. **Sahni V., Starobinsky A.** The case for a positive cosmological Λ -term // *International Journal of Modern Physics D*. 2000. Vol. 9. No. 4. Pp. 373–443.
16. **Caldwell R. R.** A phantom menace? Cosmological consequences of a dark energy component with super-negative equation of state // *Physics Letters B*. 2002. Vol. 545. No. 1–2. Pp. 23–29.
17. **Armendariz-Picon C., Mukhanov V., Steinhardt P. J.** Essentials of k -essence // *Physical Review D*. 2001. Vol. 63. No. 10. P. 103510.
18. **Sen A.** Tachyon matter // *Journal of High Energy Physics*. 2002. Vol. 2002. July. P. 07(2002)065. (arXiv:hep-th/0203265).
19. **Gasperini M., Piazza F., Veneziano G.** Quintessence as a runaway dilaton // *Physical Review D*. 2002. Vol. 65. No. 2. P. 023508.
20. **Srivastava S. K.** Future universe with $w < -1$ without big smash // *Physics Letters B*. 2005. Vol. 619. No. 1–2. Pp. 1–4.
21. **Bertolami O., Sen A. A., Sen S., Silva P. T.** Latest supernova data in the framework of the generalized Chaplygin gas model // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2004. Vol. 353. No. 1. Pp. 329–337.
22. **Bento M. C., Bertolami O., Sen A. A.** Generalized Chaplygin gas, accelerated expansion, and dark-energy-matter unification // *Physical Review D*. 2002. Vol. 66. No. 4. P. 043507.



23. **Kamenshchik A., Moschella U., Pasquier V.** An alternative to quintessence // *Physics Letters B*. 2001. Vol. 511. No. 2–4. Pp. 265–268.
24. **t' Hooft G.** Dimensional reduction in quantum gravity // *Proceedings of the Conference on Highlights of Particle and Condensed Matter Physics (SALAMEST)*, 8 – 12 March 1993. Trieste, Italy. Report No. THU-93-26. Conf. Proc. C 930308 (1993). Pp. 284 – 296.
25. **Cohen A. G., Kaplan D. B., Nelson A. E.** Effective field theory, black holes, and the cosmological constant // *Physical Review Letters*. 1999. Vol. 82. No. 25. Pp. 4971–4974.
26. **Fischler W., Susskind L.** Holography and cosmology // *Journal of High Energy Physics*. 1998. June (arXiv: hep-th/9806039 (1998)). 7 p.
27. **Granda L. N., Oliveros A.** Infrared cut-off proposal for the holographic density // *Physics Letters B*. 2008. Vol. 669. No. 5. Pp. 275–277.
28. **Granda L. N., Oliveros A.** New infrared cut-off for the holographic scalar fields models of dark energy // *Physics Letters B*. 2009. Vol. 671. No. 2. Pp. 199–202.
29. **Chattopadhyay S., Debnath U.** Holographic dark energy scenario and variable modified Chaplygin gas // *Astrophysics Space Science*. 2009. Vol. 319. No. 2–4. Pp. 183–185.
30. **Farajollahi H., Sadeghi J., Pourali M.** Stability analysis of holographic dark energy in Brans–Dicke cosmology // *Astrophysics and Space Science*. 2012. Vol. 341. No. 2. Pp. 695–700.
31. **Karami K., Fehri J.** New holographic scalar field models of dark energy in non-flat universe // *Physics Letters B*. 2010. Vol. 684. No. 2–3. Pp. 61–68.
32. **Malekjani M.** Generalized holographic dark energy model in the Hubble length // *Astrophysics and Space Science*. 2013. Vol. 347. No. 2. Pp. 405–410.
33. **Rao V. U. M., Santhi M. V., Aditya Y.** Anisotropic Bianchi type- VI_h perfect fluid cosmological models in a modified theory of gravity // *Prespacetime Journal*. 2015. Vol. 6. No. 10. Pp. 947–960.
34. **Guberina B., Horvat R., Nikolić H.** Generalized holographic dark energy and the IR cutoff problem // *Physical Review D*. 2005. Vol. 72. No. 12. P. 125011.
35. **Mete V. G., Murade P. B., Bansod A. S.** LRS Bianchi type I universe filled with interacting cold dark matter and holographic dark energy // *The African Review of Physics*. 2017. Vol. 12. No. 0017. Pp. 125–129.
36. **Ghaffari S.** Holographic dark energy model in the DGP brane world with time varying holographic parameter // *New Astronomy*. 2019. Vol. 67. February. Pp. 76–84.
37. **Rahman M. A., Ansari M.** Interacting holographic polytropic gas model of dark energy with hybrid expansion law in Bianchi type- VI_0 space-time // *Astrophysics and Space Science*. 2014. Vol. 354. No. 2. Pp. 617–625.
38. **Saridakis N. E.** Ricci – Gauss – Bonnet holographic dark energy // *Physical Review D*. 2018. Vol. 97. No. 6. P. 064035.
39. **Srivastava S., Sharma U. K., Pradhan A.** New holographic dark energy in Bianchi-III universe with k -essence // *New Astronomy*. 2019. Vol. 68. April. Pp. 57–64.
40. **Katore S. D., Kapse D. V.** Dynamics of Bianchi type VI_0 holographic dark energy models in general relativity and Lira's geometry // *Pramana – Journal of Physics*. 2017. Vol. 88. No. 2. P. ID0030.
41. **Samanta G. C., Dhal S. N.** Higher dimensional cosmological model filled with perfect fluid in $f(R, T)$ theory of gravity // *International Journal of Theoretical Physics*. 2013. Vol. 52. No. 4. Pp. 1334–1344.
42. **Santhi M. V., Rao V. U. M., Gusu D. M., Aditya Y.** Bianchi type-III holographic dark energy model with quintessence // *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*. 2018. Vol. 15. No. 9. P. 1850161.
43. **Gusu D. M., Santhi M. V.** Analysis of Bianchi type V holographic dark energy models in general relativity and Lira's geometry // *Advances in High Energy Physics*. 2021. Vol. 2021. January. P. ID 8818590.
44. **Kim R. G., Ri Ch. H.** Generalized holographic dark energy and cosmic coincidence // *New Astronomy*. 2021. Vol. 84. April. P. 101540.
45. **Pourojaghi S., Malekjani M.** A new comparison between holographic dark energy and standard Λ -cosmology in the context of cosmography method // *The European Physical Journal C*. 2021. Vol. 81. No. 7. P. 575.
46. **Shaikh A. Y., Wankhade K. S.** Panorama behaviors of holographic dark energy models in modified gravity // *Foundations of Physics*. 2021. Vol. 51. No. 3. P. 58.

47. Smoot G. F., Bennett C. L., Kogyt A., et al. Structure in the COBE differential microwave radiometer first-year maps // The Astrophysical Journal. 1992. Vol. 396. September. Pp. L1–L5.
48. Ade P. A. R., Aghanim N., Acrami Y., et al. (Planck collaboration). Isotropy and statistics of the CMB // Astronomy & Astrophysics. 2016. Vol. 594. October. Planck 2015 results. P. A16 (62 p.).

THE AUTHORS

MAHANTA Chandra Rekha

Gauhati University

Guwahati, Assam, 781014, India

crmahanta@gauhati.ac.in

ORCID: 0000-0002-8019-8824

DAS Manash Pratim

Gauhati University

Guwahati, Assam, 781014, India

manashpratimdas22222@gmail.com

ORCID: 0000-0002-1179-8068

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАХАНТА Чандра Рекха – *MSc., Ph.D., доцент кафедры математики Университета Гаухати, г. Гаухати, Индия.*

Guwahati, Assam, India, 781014

crmahanta@gauhati.ac.in

ORCID: 0000-0002-8019-8824

ДАС Манаш Пратим – *ассистент кафедры математики Университета Гаухати, г. Гаухати, Индия.*

Guwahati, Assam, India, 781014

manashpratimdas22222@gmail.com

ORCID: 0000-0002-1179-8068

Received 01.08.2021. Approved after reviewing 21.03.2022. Accepted 21.03.2022.

Статья поступила в редакцию 01.08.2021. Одобрена после рецензирования 21.03.2022. Принята 21.03.2022.

Научная статья

УДК 512

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15209>

О КЛАССАХ СОПРЯЖЕННОСТИ В ГРУППЕ F_4 НАД РОЛЕМ q С ХАРАКТЕРИСТИКОЙ 2

Н. В. Юрова 

Нижегородский государственный технический университет
им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, Россия

 yurova1980@yandex.ru

Аннотация. Данная статья продолжает цикл работ, посвященных решению проблемы, согласно которой неединичный класс сопряженности в конечной простой неабелевой группе содержит коммутирующие элементы. Ранее это утверждение было проверено для спорадических, проективных, знакопеременных групп и ряда исключительных групп. В этой работе проверяется справедливость вышеупомянутого утверждения для серии исключительных конечных простых групп ${}^2F_4(q)$. После основных определений доказываются две теоремы: о содержании в группе коммутирующих элементов и о наличии сопряжения полупростого элемента со своим обратным. Затем рассмотрены классы унипотентных и смешанных элементов. Используемые в статье методы исследования рекомендовано применять для проверки общей гипотезы при рассмотрении других групп.

Ключевые слова: группа Шевалле, классы сопряженности, конечная простая группа, коммутирующий элемент

Для цитирования: Юрова Н. В. О классах сопряженности в группе F_4 над роле q с характеристикой 2 // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 93–101. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15209>

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.15209>

ON CONJUGACY CLASSES OF THE F_4 GROUP OVER A FIELD q WITH CHARACTERISTIC 2

N. V. Yurova 

Nizhni Novgorod State Technical University named after R. E. Alekseev,
Nizhni Novgorod, Russia

 yurova1980@yandex.ru

Abstract. This article continues a series of papers devoted to solving the problem by which a non-identity conjugacy class in a finite simple non-Abelian group contains commuting elements. Previously, this statement was tested for sporadic, projective, alternating groups and some exceptional groups. In this article, the validity of the above-mentioned statement for the series exceptional groups ${}^2F_4(q)$ has been verified. After some basic definitions two theorems were proved. The former said about the content of commuting elements in the group, the latter

did about the presence of conjugation of a semisimple element with its inverse. Then classes of unipotent and mixed elements were considered. The investigative techniques used were recommended for testing the general hypothesis when dealing with other groups.

Keywords: Chevalley group, conjugacy classes, finite simple group, commuting element

For citation: Yurova N. V., On conjugacy classes of the F_4 group over a field q with characteristic 2, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 93–101. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15209>

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

Введение

Проблема, для решения которой необходимо провести вычисления в теории конечных групп, возникла при изучении леводистрибутивных квазигрупп, т. е. при исследовании бинарных систем $G(\circ)$ с тождеством левой дистрибутивности

$$x \circ (y \circ z) = (x \circ y) \circ (x \circ z) \text{ для } x, y, z \in G(\circ).$$

Привлекательность тождества левой дистрибутивности состоит в том, что в бинарной системе $G(\circ)$ с ним отображение

$$L_a = (x \rightarrow a \circ x)$$

есть, очевидно, эндоморфизм, а если $G(\circ)$ – квазигруппа, то даже и автоморфизм.

Данное направление основательно изучено в работе [1]. Исследование леводистрибутивных квазигрупп эквивалентно рассмотрению однородных пространств, т. е. множество смежных классов групп Π по некоторой ее подгруппе T . Если перейти к группоидам, ослабляя аксиому правой делимости $x \circ a = a \Rightarrow x = a$, то, вообще говоря, представить группоид однородным пространством нельзя.

Леводистрибутивные группоиды в приложениях встречаются довольно часто, и обнаруживаются их глубокие связи с группами. Можно указать симметрические пространства в дифференциальной геометрии, характеристику узлов из топологии [2, 3]. Для конечных групп возможность их представления однородным пространством были высказаны Л. Н. Ерофеевой в ряде работ [4 – 6]. Это утверждение оказывается эквивалентным чисто теоретико-групповой гипотезе, согласно которой при объединении двух классов сопряженности конечных групп всегда найдутся коммутирующие элементы. В статье [7] высказано более сильное утверждение, согласно которому в неабелевой конечной группе неединичный класс должен содержать коммутирующие элементы.

Настоящая статья продолжает проверку гипотезы, высказанной в работе [7], согласно которой неединичный класс сопряженных элементов в конечной простой группе содержит коммутирующие элементы. В статьях [8 – 11] с моим соавторством были проверены некоторые исключительные группы лиевского типа и простые группы $SP_4(q)$. Эта работа посвящена проверке серии исключительных групп ${}^2F_4(q)$.

Основные определения

Общие сведения о группах Шевалле предполагаются известными. Они достаточно подробно представлены в монографии Р. Стейнберга [12]. Специфические результаты о строении групп $F_4(q)$ и ${}^2F_4(q)$ можно найти, в первую очередь, в статьях К. Шиноды [13, 14], а также в работе группы авторов [15].

В обозначениях будем в основном следовать таковым, принятым в статьях К. Шиноды [13, 14]. Отметим некоторые отличия. Основное поле в группе $F_4(q)$ – это поле из q -элементов, $q = 2^{2n+1}$; Шинода же в своей работе вместо q использует букву l , а $q = \sqrt{l}$. Далее,

вместо $x_\alpha(t)$ для $\alpha = e_i \pm e_j$ он использует обозначение $x_{i\pm j}$, а для $\alpha = \frac{1}{2}(e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4)$ использует запись $x_{\frac{1}{2}(1\pm 2\pm 3\pm 4)}$.

Приведем основные определения о группах $F_4(q)$ и ${}^2F_4(q)$. Диаграмма Дынкина типа F_4 имеет вид, представленный на рис. 1. В ней вершины графа 1, 2, 3, 4 соответствуют корням

$$e_2 - e_3; \quad e_3 - e_4; \quad e_4; \quad \frac{1}{2}(e_1 - e_2 - e_3 - e_4),$$

где $e_i (i = 1 - 4)$ – система ортогональных единичных векторов в R^4 .

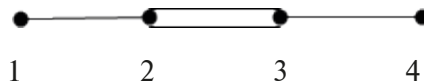


Рис.1. Диаграмма Дынкина:
вершины графа 1 – 4 соответствуют корням $e_2 - e_3, e_3 - e_4, e_4, (e_1 - e_2 - e_3 - e_4)/2$

Полная система корней состоит из векторов

$$\pm e_i; \pm e_i \pm e_j (i \neq j) \text{ и } \frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4).$$

Группа $F_4(q)$ строится на образующих $x_\alpha(t)$, где α – корень, $t \in F_q$ – конечное поле из q элементов с определенными соотношениями (см. [12, С. 32]), из которых отметим коммутаторную форму:

$$(x_\alpha(t), x_\beta(t)) = \prod_{x_{\alpha+\beta}} (c_{ij} t^i u^j) \quad (\alpha + \beta \neq 0),$$

где c_{ij} – некоторые константы из основного поля.

«Скрученная» группа ${}^2F_4(q)$ строится следующим образом. В диаграмме Дынкина (см. рис. 1) выделяется так называемый автоморфизм $\sigma: 1 \leftrightarrow 4; 2 \leftrightarrow 3$. Оказывается, его можно продолжить до некоторой перестановки всех корней, причем длинный переводится в короткий, и, наоборот, короткий в длинный. В поле F_{q^2} выделяется автоморфизм $\Theta: x \rightarrow x^{2^n}$, называемый полевым. Теперь автоморфизм σ на группе $F_4(q)$ действует на образующих $x_\alpha(t)$ – корневых подгруппах таким образом:

$$\sigma: x_\alpha(t) \rightarrow \begin{cases} x_{\sigma(\alpha)}(t^\Theta), & \text{если } \alpha \text{ – длинный корень,} \\ x_{\sigma(\alpha)}(t^{2\Theta}), & \text{если } \alpha \text{ – короткий корень.} \end{cases}$$

Подгруппа σ -неподвижных элементов в группе $F_4(q)$ и есть нужная группа ${}^2F_4(q)$. Последняя при $n \geq 1$ является простой. Несколько особняком стоит группа ${}^2F_4(2)$, для которой в случае $n = 0$ полевой автоморфизм Θ тождествен. Эта группа не есть простая, но простым является ее коммутант $({}^2F_4(2))'$ индекса 2 в ${}^2F_4(2)$.

Анализ особенностей группы ${}^2F_4(q)$

В последующем исследовании группы ${}^2F_4(q)$ существенную роль играют следующее утверждения.

Утверждение 1. *В простой конечной группе класс инволюций содержит коммутирующие элементы.*

В его доказательстве нет надобности; оно вытекает из теоретико-групповой теоремы Глаубермана, подробную информацию об этом можно найти в работе [7].

Утверждение 2. *Если число классов элементов данного порядка n с централизаторами одного и того же порядка меньше $\phi(n)$, то в классе найдутся коммутирующие элементы.*

Здесь $\varphi(n)$ – функция Эйлера.

Это утверждение можно считать элементарным, оно также доказывается в публикации [7].

Перейдем к исследованию соответствующей группы.

Теорема 1. В группе ${}^2F_4(q)$ неединичный класс сопряженности содержит коммутирующие элементы.

Доказательство. Обратимся к данным табл. 1, где приведены классы элементов и их централизаторы для группы $({}^2F_4(2))'$ (таблица взята из атласа [16]). В данной таблице, например, имеется представитель класса сопряженности $8A, 8B^{**}$; это означает, что имеется два класса $8A$ и $8B^{**}$ элементов 8-го порядка с централизаторами соответствующих элементов порядка 32. Наличие коммутирующих элементов в классе инволюций обеспечивается Утверждением 1, по которому этот факт верен для любой конечной простой группы. Для остальных классов применяется Утверждение 2.

Теорема доказана.

Таблица 1

Представители классов сопряженности для группы $({}^2F_4(2))'$

Класс элементов	Централизатор
$2A$	10240
$2B$	1536
$3A$	102
$4A$	192
$4B$	128
$4C$	64
$5A$	50
$6A$	12
$8A, 8B^{**}$	32×2
$8C, 8D$	16×2
$10A$	10
$12A, 12B$	12×2
$13A, 13B^*$	13×2
$16A, 16B^{**}, 16C^{*5}, 16D^{*5}$	16×4

Перейдем теперь к исследованию классов полупростых элементов.

Теорема 2. Полупростой элемент в группе ${}^2F_4(q)$ сопряжен со своим обратным.

Доказательство. Следует отметить, что полупростой элемент имеет нечетный порядок, т.е. среди полупростых элементов нет инволюций. В алгебраической группе \bar{G} , получающейся из группы G , алгебраическим замыканием поля F_q полупростой элемент сопряжен с картановским элементом, т.е. элементом вида

$$h_{\alpha_1}(t_1)h_{\alpha_2}(t_2)\dots,$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots$ – простые корни.

Обозначим через ω элемент группы Вейля, который можно получить, если взять произведение отражений относительно четырех ортогональных корней, например, относительно векторов e_1, e_2, e_3, e_4 . Сопряжение картановского элемента с помощью ω переводит его в равенство

$$h_{w(\alpha_1)}(t_1)h_{w(\alpha_2)}(t_2)\dots = h_{-\alpha_1}(t_1)h_{-\alpha_2}(t_2)\dots$$

Но элемент $h_{-\alpha_i}(t)h_{-\alpha_i}(t^{-1})$ коммутирует с элементами любой корневой подгруппы $x_{\beta}(u)$, а центр в универсальной и присоединенной группе типа F_4 тривиален [17].

Поэтому $h_{-\alpha_i}(t) = (h_{\alpha_i}(t))^{-1}$ сопряжен с $h_{\alpha_i}(t)$. Таким образом, полупростой элемент сопряжен с обратным в алгебраической группе. Сопряженность в подгруппе ${}^2F_4(q)$ алгебраической группы следует из указанного выше замечания о тривиальности центра [17, 18].

Дальнейшая логика здесь такова. Алгебраическая группа F_4 односвязна, централизатор полупростого элемента связан (см. [17, С. 192, предл. 3.9]). При переходе от алгебраической группы G к G_{σ} , расщепления класса полупростых элементов не происходит, т.е. элемент из группы G_{σ} , сопряженный в G , сопряжен и в G_{σ} (см. [17, С. 171, предл. 3.4 (с)]). А сопряженность полупростого элемента с обратным в алгебраической группе отмечена выше.

Теорема доказана.

Далее рассмотрим класс унитарных элементов.

В ${}^2F_4(q)$ насчитывается 18 классов унитарных элементов, перечисленных в статье [13] вместе с порядками централизаторов соответствующих элементов. Приведем фрагмент этой таблицы (табл. 2).

Таблица 2
Отобранные классы унитарных элементов

u	$ Z(u) $	$u \sim x$
u_1	$q^{12}(q-1)(q^2+1)$	x_3
u_2	$q^{10}(q^2-1)$	x_4
u_3	$2q^7(q-1)(q^2+1)$	x_{10}
u_4	$2q^7(q-1)(q^2+1)$	x_{10}
u_{11}	$4q^4$	x_{28}
u_{12}	$4q^4$	x_{28}
u_{13}	$2q^3$	x_{29}
u_{14}	$2q^3$	x_{29}
u_{15}	$4q^4$	x_{34}
u_{16}	$4q^2$	x_{32}
u_{17}	$4q^2$	x_{34}
u_{18}	$4q^2$	x_{32}

Обозначения: u_i, x_i – представители класса в подгруппах ${}^2F_4(q)$ и в $F_4(q)$ соответственно, $|Z(u)|$ – порядок централизатора $Z(u)$ соответствующего элемента.

Оба класса обратны друг другу, что нетрудно проверить с помощью коммутаторной формулы или принять во внимание, что оба класса сливаются в $F_4(q)$. Таким образом, достаточно рассмотреть один из них, например x_4 .

Имеем следующее равенство:

$$u_4 = \alpha_5(1) = x_2(1)x_{1-2}(1)x_4(1).$$

Этот элемент лежит в подгруппе, порожденной корневыми подгруппами

$$x_{\pm 2}(t), x_{\pm(1-2)}(t), x_{\pm 1}(t).$$

Этой подгруппе соответствует следующая диаграмма Дынкина на рис. 2.

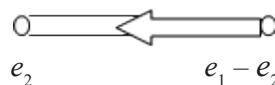


Рис. 2. Диаграмма Дынкина:
 $e_2, (e_1 - e_2)$ – корни вершин графа

Диаграмма Дынкина строится известным образом, исходя из скалярного произведения корней вершин. Графовый автоморфизм представляет вершины, полевой остается прежним, таким же, как в группе $F_4(q)$.

Скрученный вариант приводит к группе Сузуки ${}^2B_2(q)$, для которой гипотеза, высказанная в статье [7], уже проверена авторами работы [9]. Таким образом, в классе сопряженных элементов u_3 коммутирующие элементы обязательно найдутся даже в подгруппе ${}^2B_2(q) \subset {}^2F_4(q)$.

Перейдем к исследованию классов смешанных элементов.

Сведения о смешанных элементах сведены в таблицу в статье К. Шиноды [13], которая воспроизводится ниже (табл. 3).

В статье К. Шиноды [13] в таблицу не выписаны классы $x_5 - x_{10}$, поскольку соответствующие представители сопряжены с обратными из-за единственности значения порядка централизатора.

В статье [15] указаны порядки представителей классов x_i . Так, в частности, представители классов u_1 и u_2 будут инволюциями (x_3, x_4 имеют порядок, равный 2). Следовательно, в них имеются коммутирующие элементы, в силу Утверждения 1. Порядки элементов u_{11} и u_{12} , равные порядкам элементов x_{28} , равны 8, поэтому, согласно Утверждению 1, в обоих классах есть коммутирующие элементы. Те же рассуждения применяются как для классов u_{13}, u_{14} , порядки элементов которых равны 8, так и для классов $u_{15} - u_{18}$, порядки элементов которых равны 16.

Остается рассмотреть классы с представителями

$$u_3 = x_2(1)x_{1-2}(1)x_4(1)x_1(1)x_{1+2}(1)$$

$$\text{и } u_4 = x_2(1)x_{1-2}(1)x_4(1).$$

Таблица 3 [13]

Классы смешанных элементов

N	Представитель класса	Порядок централизатора
1	$t_1 x_1(1) x_{1+2}(1)$	$q^2(q-1)$
2	$t_1 x_{1-2}(1) x_2(1) x_1(1)$	$2q(q-1)$
3	$t_1 x_{1-2}(1) x_2(1) x_{1+2}(1)$	$2q(q-1)$
4	$t_2 x_{1+2-3+4}(1) x_{1+4}(1)$	$q(q-1)$
5	$t_4 x_{1+2+3-4}(1) x_{1+4}(1)$	$q^3(q+1)$
6	$t_4 x_{\alpha_1}(1) x_{\alpha_2}(1) x_{1+2+3-4}(\tau_0) x_{\beta_1}(1) x_{\beta_2}(1) x_{1+4}(\tau_0^{2\Theta})$	$3q^2$
7	$t_4 x_{\alpha_1}(\eta) x_{\alpha_2}(\eta^l) x_{1+2+3-4}(\tau_1) x_{\beta_1}(\eta^{2\Theta}) x_{\beta_2}(\eta^{2\Theta l}) x_{1+4}(\tau_1^{2\Theta})$	$3q^2$
8	$t_4 x_{\alpha_1}(\eta^2) x_{\alpha_2}(\eta^{3l}) x_{1+2+3-4}(\tau_2) x_{\beta_1}(\eta^{4\Theta}) x_{\beta_2}(\eta^{4\Theta l}) x_{1+4}(\tau_2^{2\Theta})$	$3q^2$
9	$t_5 x_{1+2+3-4}(1) x_{1+4}(1)$	$q(q+1)$
10	$t_7 x_1(1) x_{1+2}(1)$	$q^2(q - \sqrt{2q} + 1)$
11	$t_7 x_{1-2}(1) x_2(1) x_1(1)$	$2q(q - \sqrt{2q} + 1)$
12	$t_7 x_{1-2}(1) x_2(1) x_{1+2}(1)$	$2q(q - \sqrt{2q} + 1)$
13	$t_9 x_1(1) x_{1+2}(1)$	$q^2(q + \sqrt{2q} + 1)$
14	$t_9 x_{1-2}(1) x_2(1) x_1(1)$	$2q(q + \sqrt{2q} + 1)$
15	$t_9 x_{1-2}(1) x_2(1) x_{1+2}(1)$	$2q(q + \sqrt{2q} + 1)$

Здесь представители классов записаны в виде произведения полупростого и унипотентного множителей, т. е. $x = x_u \cdot u_s$ – разложение смешанного элемента в произведение полупростого множителя x_s и унипотента u_s . Множители коммутируют, если разложение Жорданово, но в табл. 3 для представителей классов смешанных элементов это требование не всегда выполнено. Из существования жорданова разложения смешанного элемента следует, что он лежит в централизаторе полупростого множителя. Структура же централизаторов полупростых множителей легко определяется. Каждый такой централизатор $Z(t)$ содержит степени t и, будучи редуktивной группой, имеет полупростой фактор. Рассматривать элементы $t_3, t_6, t_8, t_{10}, t_{11}, t_{12}$ нет надобности, так как их централизаторы не содержат унипотентов полупростых элементов. Просмотр централизаторов $t_1, t_2, t_4, t_5, t_7, t_9$ показывает, что как редуktивная группа они имеют полупростые части порядков. Структура централизаторов рассматриваемых полупростых элементов представлена в табл. 4. В ней множитель типа Z_m является циклической группой, состоящей из степеней t и входящей в центр централизатора t . Вторые множители ${}^2B_2(q), SL_2(q), U_3(q)$ представляют собой группу Сузуки, линейную группу и унитарную соответственно. Отметим, что эти множители являются простыми группами. Наличие коммутирующих унипотентных множителей, лежащих в одном классе, для группы Сузуки ${}^2B_2(q)$ и линейной $SL_2(q)$ доказано в работе [7]. Для унитарной группы коммутант силовской p -подгруппы лежит в ее центре. Если унипотент лежит в центре, то сопряжение его элементом из кар-



Таблица 4

Структура централизаторов полупростых элементов

t	Порядок централизатора	Структура
t_1	$(q-1)q^2(q-1)(q^2+1)$	$Z_{q-1} {}^2B_2(q)$
t_2	$(q-1)q(q-1)$	$Z_{q-1} SL_2(q)$
t_4	$3\frac{1}{3}q^3(q^2-1)(q^3+1)$	$Z_3 U_3(q)$
t_5	$(q+1)q(q^2-1)$	$Z_{q+1} SL_2(q)$
t_7	$(q-\sqrt{2q+1})q^2(q-1)(q+1)$	$Z_{q-\sqrt{2q+1}} {}^2B_2(q)$
t_9	$(q+\sqrt{2q+1})q^2(q-1)(q+1)$	$Z_{q+\sqrt{2q+1}} {}^2B_2(q)$

тановской подгруппы дает коммутирующий элемент из того же класса сопряженности. Если же унипотент u не из центра силовой p -подгруппы, то найдется другой унипотент u' , не коммутирующий с u . Элементы u и $u'' = u' \cdot u \cdot (u')^{-1}$ лежат в одном классе и коммутируют, так как их коммутатор лежит в центре силовой p -подгруппы. Элементы x и $u' \cdot x \cdot (u')^{-1}$, очевидно, коммутируют и лежат в одном классе, причем различны, поскольку $u \neq u''$. Таким образом, рассмотрение смешанных элементов закончено.

Заключение

Данная работа является очередным этапом проверки общей гипотезы, согласно которой неединичный класс сопряженности в конечной простой неабелевой группе содержит коммутирующие элементы. В настоящей статье излагаются методы проверки этой гипотезы для исключительной группы ${}^2F_4(q)$.

Методы исследования, которые здесь использовались, можно непосредственно применять для проверки общей гипотезы при рассмотрении других групп.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галкин В. М., Ерофеева Л. Н. Леводистрибутивные алгебраические системы. Нижний Новгород: Нижегород. гос. техн. ун-т им. Р. Е. Алексеева, 2018. 158 с.
2. Хелгасон С. Дифференциальная геометрия и симметрические пространства. Пер. с англ. А. Л. Онищика. М.: Мир, 1964. 534 с.
3. Ильиных А. П. Классификация конечных группоидов с 2-транзитивной группой автоморфизма // Математический сборник. 1994. Т. 185. № 6. С. 51–78.
4. Ерофеева Л. Н. К проблеме транзитивности L-группоидов // Международный семинар по теории групп, посвященный 70-летию А. И. Старостина и 80-летию Н. Ф. Сесекина; 17 – 21 декабря. Екатеринбург: Изд. Института математики и механики Уральского отделения РАН, 2001.
5. Ерофеева Л. Н. Группа трансляций некоторых группоидов // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. Сер. Математика. 2004. № 2. С. 96–100.
6. Ерофеева Л. Н. Об одном классе группоидов // Записки научных семинаров ПОМИ. 2003. Т. 305. С. 136–143.
7. Галкин В. М., Ерофеева Л. Н., Лещева С. В. Коммутирующие элементы в классе сопряженности конечных групп // Известия вузов. Математика. 2016. № 8. С. 12–20.
8. Ерофеева Л. Н., Лещева С. В., Мохнина Н. В., Юрова Н. В. О простой группе Ри ${}^2G_2(q)$ // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2017. № 3 (118). С. 24–27.

9. Мохнина Н. В., Юрова Н. В. Коммутирующие элементы в классах сопряженности в группе Сузуки ${}^2B_2(q)$ // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2017. № 4 (119). С. 45–50.
10. Лещева С. В., Юрова Н. В. О классах сопряженности в группе ${}^3D_4(q)$ // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2019. № 2 (125). С. 53–60.
11. Юрова Н. В. О классах сопряженности в симплектической группе $SP_4(q)$ // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2018. № 4 (123). С. 56–60.
12. Стейнберг Р. Лекции о группах Шевалле. Пер. с англ. И. Н. Бернштейна и Н. Н. Яковлева. М.: Мир, 1975. 263 с.
13. Shinoda K., Iwahori N. The conjugacy classes of the finite Ree groups of type (F_4) // Journal of the Faculty of Science, the University of Tokyo. Sec. 1A. Mathematics. 1975. Vol. 22. Pp. 1–15.
14. Shinoda K., Iwahori N. The conjugacy classes of Chevalley groups of type (F_4) over finite fields of characteristic $p \neq 2$ // Journal of the Faculty of Science, the University of Tokyo. Sec. 1A. Mathematics. 1974. Vol. 21. No. 1. Pp. 133–159.
15. Васильев А. В., Гречкосеева М. А., Мазуров В. Д., Чао Х. П., Чен Г. Ю., Ши В. Д. Распознавание конечных простых групп $F_4(2^m)$ по спектру // Сибирский математический журнал. 2004. Т. 45. № 6. С. 1256–1262.
16. Conway J. H., Curtis R. T., Norton S. P., Parker R. A., Wilson R. A. Atlas of finite groups. Oxford: Clarendon Press, 1985. 252 p.
17. Семинар по алгебраическим группам. Сборник статей (А. Борель, Ч. Кэтрис, Т. Спрингер и др.). Пер. с англ. С. И. Гельфанда. Ред. А. А. Кириллов. М.: Мир, 1973. 317 с.
18. Горенштейн Д. Конечные простые группы. Введение в их классификацию. Пер. с англ. В. И. Логинова. М.: Мир, 1985. 352 с.

REFERENCES

1. Galkin V. M., Erofeeva L. N., Levodistributivnyye algebraicheskiye sistemy [Left-distribution algebraic systems], Publishing of Nizhni Novgorod State Technical University named after R. E. Alekseev, Nizhni Novgorod, 2018 (in Russian).
2. Helgason S., Differential geometry and symmetric spaces, 2nd edition, Amer. Mathematical Society, Providence, 2000.
3. P'inykh A. P., Classification of finite groupoids with 2-transitive automorphism group, Sb. Math. 82 (1) (1995) 175–197.
4. Erofeeva L. N., K probleme tranzitivnosti L-gruppoidov [To the problem of groupoids' transitivity], Proceedings of the International Seminar on the Group Theory dedicated to 70-th anniversary of A. I. Starostin and 80-th anniversary of N. F. Sesekin; December 17–21, Ekaterinburg (2001) (in Russian).
5. Erofeeva L. N., Gruppya translyatsiy nekotorykh gruppoidov [Translation group of some groupoids], Vestnik of Lobachevsky University of Nizhni Novgorod, Ser. Mathematics. (2) (2004) 96–100 (in Russian).
6. Erofeeva L. N., A class of groupoids, J. Math. Sci. 130 (3) (2005) 4720–4723.
7. Galkin V. M., Erofeeva L. N., Leshcheva S. V., Commuting elements in conjugacy class of finite groups, Russian Math. (Iz. VUZ). 60 (8) (2016) 9–16.
8. Erofeeva L. N., Leshcheva S. V., Mokhnina N. V., Yurova N. V., About simple group ${}^2G_2(q)$, Transactions of Nizhni Novgorod State Technical University n.a. R. Y. Alexeev. (3 (118)) (2017) 24–27 (in Russian).
9. Mokhnina N. V., Yurova N. V., Commuting elements in conjugacy classes in the group Suzuki, Transactions of Nizhni Novgorod State Technical University n.a. R. Y. Alexeev. (4 (119)) (2017) 45–50 (in Russian).
10. Leshcheva S. V., Yurova N. V., On conjugacy classes of the group ${}^3D_4(q)$, Transactions of Nizhni Novgorod State Technical University n.a. R. Y. Alexeev. (2 (125)) (2019) 53–60 (in Russian).
11. Yurova N. V., On conjugacy classes in the symplectic group $SP_4(q)$, Transactions of Nizhni Novgorod State Technical University n.a. R. Y. Alexeev. (4 (123)) (2018) 56–60 (in Russian).
12. Steinberg R., Lectures on Chevalley groups, Notes prepared by J. Faulkner and R. Wilson, Yale University, Department of Mathematics, New Haven, USA, 1967.
13. Shinoda K., Iwahori N., The conjugacy classes of the finite Ree groups of type (F_4) , J. Fac. Sci. Univ. Tokyo. Sec. 1A. Math. 22 (1975) 1–15.
14. Shinoda K., Iwahori N., The conjugacy classes of Chevalley groups of type (F_4) over finite fields



of characteristic p , J. Fac. Sci. Univ. Tokyo. Sec. 1A. Math. 21 (1) (1974) 133–159.

15. **Cao H. P., Chen C., Grechkoseeva M. A., et al.**, Recognition of the finite simple groups $F_4(2^m)$ by spectrum, Siberian Mathematical Journal. 45 (6) (2004) 1031–1035.

16. **Conway I. H., Curtis R. T., Norton S. P., et al.**, Atlas of finite groups, Clarendon Press, Oxford, 1985.

17. **Borel A., Carter R. W., Curtis Ch. W., et al.**, Seminar on algebraic groups and related finite groups: Held at the Institute for Advanced Study, Princeton, USA, 1968/1969 (Lecture Notes in Mathematics, Vol. 131), Springer, USA, 1970.

18. **Gorenstein D.**, Finite simple groups, an introduction to their classification, Plenum Publishing Corporation, New York, London, 1982.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЮРОВА Надежда Вячеславовна – старший преподаватель Института транспортных систем Нижегородского государственного технического университета имени Р. Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24

yurova1980@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-2355-2820

THE AUTHOR

YUROVA Nadezhda V.

Nizhni Novgorod State Technical University named after R. E. Alekseev

24, Minin St., Nizhni Novgorod, 603950, Russia

yurova1980@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-2355-2820

Статья поступила в редакцию 29.03.2021. Одобрена после рецензирования 19.03.2022. Принята 19.03.2022.

Received 29.03.2021. Approved after reviewing 19.03.2022. Accepted 19.03.2022.

Научная статья
УДК 539.3, 539.42
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15210>

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ИНТЕНСИВНОСТИ НАПРЯЖЕНИЙ В ОРТОТРОПНЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ СМЕШАННОЙ МОДЕ РАЗРУШЕНИЯ В ПЛОСКОМ НАПРЯЖЕННОМ СОСТОЯНИИ

А. В. Савиковский [✉], А. С. Семенов

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

[✉] savikovskij.av@edu.spbstu.ru

Аннотация. Статья посвящена вычислению коэффициентов интенсивности напряжений для прямолинейной трещины смешанной моды разрушения в ортотропном материале и его частном случае – материале с кубической симметрией. Использован метод экстраполяции перемещений и напряжений на основе формализма Лехницкого. Для рассмотренных классов материалов получены в явном виде выражения для элементов матрицы влияния через упругие константы материала в случаях его плосконапряженного состояния и наличия ненулевого угла между осями анизотропии материала и трещины. Систематически проанализированы свойства матрицы влияния. Полученные результаты верификации рассмотренных вариантов метода перемещений и напряжений показали хорошее согласие между численными и аналитическими решениями (отличие не превосходит 0,8 %).

Ключевые слова: формализм Лехницкого, ортотропный материал, коэффициент интенсивности напряжений, смешанная мода разрушения

Для цитирования: Савиковский А. В., Семенов А. С. Вычисление коэффициентов интенсивности напряжений в ортотропных материалах при смешанной моде разрушения в плоском напряженном состоянии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 102–123. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15210>

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.15210>

CALCULATION OF MIXED-MODE STRESS INTENSITY FACTORS FOR ORTHOTROPIC MATERIALS IN THE PLANE STRESS STATE

A. V. Savikovskii [✉], A. S. Semenov

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

[✉] savikovskij.av@edu.spbstu.ru

Abstract. In the article, stress intensity factors for a straight crack of a mixed-fracture mode in the orthotropic material and in its particular case, namely, in the material with cubic symmetry, have been calculated. The displacement and stress extrapolation method based on the



Lekhnitskii formalism was used. For considered classes of materials, the explicit expressions for influence matrix elements were obtained through the elastic constants of the material in the cases of its planar-stressed state and given a non-zero angle between the material's anisotropy and the crack's axes. Influence matrix properties were analyzed systematically. The obtained results of verification of considered variants of the displacement and stress extrapolation method exhibited a good agreement between the numerical and analytical solutions (the difference did not exceed 0.8 %).

Keywords: Lekhnitskii formalism, orthotropic material, stress intensity factor, mixed-mode fracture

For citation: Savikovskii A. V., Semenov A. S., Calculation of mixed-mode stress intensity factors for orthotropic materials in the plane stress state, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 102–123. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15210>

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

Введение

Монокристаллические жаропрочные сплавы на никелевой основе [1 – 3] находят широкое применение в качестве конструкционного материала для ответственных деталей (в первую очередь, лопаток) газотурбинных двигателей (ГТД) [4 – 7], работающих при температурах свыше 1000 °С [8, 9]. Жаропрочные никелевые сплавы на микроструктурном уровне состоят из γ -фазы (твердый раствор на основе никеля) и упрочняющей γ' -фазы [1, 4, 7]. Монокристаллические никелевые сплавы обладают кубической симметрией термоупругих свойств и могут рассматриваться как частный случай ортотропного материала с равными свойствами вдоль кристаллографических осей [100], [010] и [001].

Охлаждаемые рабочие лопатки ГТД, изготовленные из жаропрочных никелевых сплавов, оказываются наиболее нагруженными элементами ГТД [10 – 15], на которые действуют центробежные силы и давление газа, а также нестационарные и неоднородные температурные поля. Вследствие действия различных комбинированных переменных нагрузок, в рабочих лопатках ГТД образуются трещины усталости, ползучести и термоусталости [4, 16, 17].

Явления термоусталости, зарождения и распространения трещин в монокристаллических никелевых сплавах часто исследуются экспериментальным путем, например, на корсетных образцах [4]. Процесс зарождения термоусталостной трещины в корсетном образце с помощью метода конечных элементов (МКЭ) моделировали в работах [18, 19]. Оценка трещиностойкости никелевых сплавов и разработка методов вычисления параметров разрушения, в случае кубической симметрии и ортотропных материалов, представляет собой актуальную задачу, не получившую пока окончательного решения.

В качестве основных параметров разрушения в данной работе рассматриваются коэффициенты интенсивности напряжений (КИН). При вычислении КИН в анизотропных материалах в общем случае возникает необходимость анализа смешанных мод разрушения.

Цель настоящей работы – получение в явном виде формул для вычисления КИН через перемещения берегов в окрестности вершины трещины.

Для этого используется численный метод экстраполяции перемещений в вершину трещины в материале с кубической симметрией и в ортотропном материале. Для сравнения также рассматривается метод экстраполяции напряжений.

Весьма эффективным способом при этом является использование формализма Лехницкого [20]. Верификация предложенных соотношений, а также валидация метода экстраполяции напряжений проводится для изо- и ортотропного материалов, а также для материала с кубической симметрией.

Определяющие уравнения

Определяющие уравнения для линейного упругого материала имеют следующий вид [21, 22]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = {}^4\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформаций, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, ${}^4\mathbf{S}$ – тензор упругой податливости материала.

Систему линейных уравнений (1) удобно переписать в матричном виде:

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = [\mathbf{S}]\{\boldsymbol{\sigma}\}, \quad (2)$$

где введены обозначения для вектор-столбцов, составленных из компонент тензоров

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} \quad \text{и} \quad \{\boldsymbol{\sigma}\} = \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix}.$$

Порядок перечисления компонент соответствует нотации Фойгта.

Матрица упругой податливости $[\mathbf{S}]$ 6×6 , соответствующая тензору податливости ${}^4\mathbf{S}$, имеет различный вид для материалов разной структуры.

Случай ортотропного материала:

$$[\mathbf{S}] = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{12}}{E_1} & -\frac{\nu_{13}}{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & -\frac{\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{E_1} & -\frac{\nu_{23}}{E_2} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где E_1, E_2, E_3 – модули Юнга; G_{23}, G_{13}, G_{12} – модули сдвига; $\nu_{23}, \nu_{13}, \nu_{12}$ – коэффициенты Пуассона.

Случай кубической симметрии:

$$[S] = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Случай изотропного материала:

$$[S] = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

где E – модуль Юнга, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона.

Численные методы определения КИН и формализм Лехницкого

Рассматривается задача об одноосном растяжении ортотропной плоскости (пластины) с одиночной наклонной прямолинейной трещиной в предположении плоского напряженного состояния. Оси введенной системы координат совпадают с осями анизотропии материала и направлением нагружения. Ориентация трещины не совпадает с осями анизотропии материала и направлением нагрузки (рис. 1).

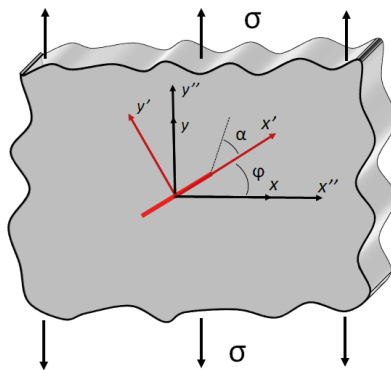


Рис. 1. Схема одноосного растяжения ортотропной плоскости с одиночной наклонной прямолинейной трещиной (выделена красной линией):

x, y – оси глобальной системы координат; x', y' – оси системы координат трещины; x'', y'' – оси анизотропии материала; φ – угол расположения трещины, α – угол между направлением на точку и осью трещины; стрелки указывают направления нагружения (σ – одноосное растягивающее напряжение)

Асимптотические выражения для перемещений в окрестности вершины трещины в общем трехмерном случае, при наличии трех мод разрушения (ненулевые значения коэффициентов K_I, K_{II}, K_{III}), для изотропного материала представляются соотношениями, приведенными в книге [22]. Аналогичные выражения для анизотропного материала получаем на основе использования формализма Лехницкого; они имеют следующий вид [23 – 25]:

$$\begin{aligned}
 u_x(r, \alpha) &= \frac{K_I \sqrt{2r}}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\mu'_1 p_2 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha} - \mu'_2 p_1 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha} \right) \right) + \\
 &+ \frac{K_{II} \sqrt{2r}}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_2 - \mu'_1} \left(p_2 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha} - p_1 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha} \right) \right), \\
 u_y(r, \alpha) &= \frac{K_I \sqrt{2r}}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\mu'_1 q_2 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha} - \mu'_2 q_1 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha} \right) \right) + \\
 &+ \frac{K_{II} \sqrt{2r}}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(q_2 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha} - q_1 \sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha} \right) \right), \\
 u_z(r, \alpha) &= \frac{K_{III} \sqrt{2r}}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_3 \sin \alpha}}{C'_{45} + \mu_3 C'_{44}} \right),
 \end{aligned} \tag{6}$$

где $u_x(r, \alpha), u_y(r, \alpha), u_z(r, \alpha)$ – осевые перемещения в системе координат трещины; K_I, K_{II}, K_{III} – КИН для I, II, III моды разрушения; r – расстояние до рассматриваемой точки вершины трещины; α – угол между направлением на точку и осью трещины; C'_{ij} – константы матрицы жесткости материала в системе координат трещины, $[C] = [S]^{-1}$;

$p_i = S'_{11} \mu_i'^2 + S'_{12} - S'_{16} \mu_i'$, $q_i = S'_{12} \mu_i' + \frac{S'_{22}}{\mu_i'} - S'_{26}$ (S'_{ij} – константы матрицы податливости материала в системе координат трещины); μ'_1, μ'_2 – корни уравнения 4-ой степени, имеющего вид

$$S'_{11} \mu^4 - 2S'_{16} \mu^3 + (2S'_{12} + S'_{66}) \mu^2 - 2S'_{26} \mu + S'_{22} = 0, \tag{7}$$

с положительной мнимой частью; μ'_3 – корень уравнения

$$C'_{44} \mu^2 - 2C'_{45} \mu + C'_{55} = 0,$$

также с положительной мнимой частью.

Перемещения на свободных берегах трещины определяются с помощью выражений, представленных в книге [22], при этом угол между направлением на точку и осью трещины α принимается равным π . С помощью полученных выражений можно найти значения КИН через перемещения берегов трещины; для изотропного материала они принимают вид

$$\begin{aligned}
 K_I &= u_y(r, \pi) \sqrt{\frac{2\pi}{r}} \cdot \frac{2G}{1+\kappa}, \\
 K_{II} &= u_x(r, \pi) \sqrt{\frac{2\pi}{r}} \cdot \frac{2G}{1+\kappa}, \\
 K_{III} &= u_z(r, \pi) \sqrt{\frac{2\pi}{r}} \cdot G.
 \end{aligned} \tag{8}$$



В случае анизотропного материала, в результате подстановки $\alpha = \pi$ в выражения (6) получаем формулу вида

$$\{\mathbf{u}\} = \sqrt{\frac{2r}{\pi}} [\mathbf{B}] \cdot \{\mathbf{K}\}, \quad (9)$$

где $\{\mathbf{u}\} = \begin{Bmatrix} u_x(r, \pi) \\ u_y(r, \pi) \\ u_z(r, \pi) \end{Bmatrix}$, $\{\mathbf{K}\} = \begin{Bmatrix} K_I \\ K_{II} \\ K_{III} \end{Bmatrix}$;

$$[\mathbf{B}] = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}\left(\frac{\mu'_1 p_2 - \mu'_2 p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{p_2 - p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & 0 \\ \operatorname{Re}\left(\frac{\mu'_1 q_2 - \mu'_2 q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{q_2 - q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{C'_{44} C'_{55} - C'^2_{45}}} \end{pmatrix} \text{ — матрица } 3 \times 3 \text{ взаимного влияния}$$

трех компонент вектора относительного смещения берегов трещины на три КИН.

Результат обращения (9) позволяет вычислить КИН через перемещения берегов трещины в случае анизотропного материала [26, 27]:

$$\{\mathbf{K}\} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot [\mathbf{B}]^{-1} \cdot \{\mathbf{u}\}, \quad (10)$$

где $[\mathbf{B}]^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\det[\mathbf{D}]} \operatorname{Re}\left(\frac{\mu'_1 p_2 - \mu'_2 p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \frac{1}{\det[\mathbf{D}]} \operatorname{Re}\left(-\frac{p_2 - p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & 0 \\ \frac{1}{\det[\mathbf{D}]} \operatorname{Re}\left(-\frac{\mu'_1 q_2 - \mu'_2 q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \frac{1}{\det[\mathbf{D}]} \operatorname{Re}\left(\frac{q_2 - q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{C'_{44} C'_{55} - C'^2_{45}} \end{pmatrix}$, (11)

$$\det[\mathbf{D}] = \begin{vmatrix} \operatorname{Re}\left(\frac{\mu'_1 p_2 - \mu'_2 p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{p_2 - p_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) \\ \operatorname{Re}\left(\frac{\mu'_1 q_2 - \mu'_2 q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{q_2 - q_1}{\mu'_1 - \mu'_2} i\right) \end{vmatrix}.$$

Стоит отметить, что если система координат трещины не совпадает с осями анизотропии материала (а в случае смешанной моды разрушения так и происходит), то константы матрицы податливости и жесткости должны быть преобразованы в систему координат трещины и корни μ'_1 , μ'_2 должны находиться из уравнения 4-ой степени с константами податливости в системе координат трещины.

В случае поворота системы координат, матрица перехода от одной системы координат к другой при повороте в плоскости на угол φ имеет вид

$$Q = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и формула преобразования элементов тензора упругих податливостей и упругих модулей 4-го ранга из старой в новую систему координат имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} S'_{ijkl} &= Q_{im} \cdot Q_{jn} \cdot Q_{ko} \cdot Q_{lp} \cdot S_{mnop}, \\ C'_{ijkl} &= Q_{im} \cdot Q_{jn} \cdot Q_{ko} \cdot Q_{lp} \cdot C_{mnop}, \end{aligned} \quad (12)$$

где S_{mnop}, S'_{ijkl} – элементы тензора податливости в исходной и повернутой (связана с трещиной) системах координат, соответственно; C_{mnop}, C'_{ijkl} – элементы тензора жесткости в исходной и повернутой (связана с трещиной) системах координат, соответственно.

При использовании формул (8) и (10), перемещения также нужно преобразовать из глобальной системы координат в систему координат, связанную с трещиной.

Если осуществить поворот в плоскости на угол φ для случая ортотропного материала и преобразовать тензоры упругих модулей, упругих податливостей и поворота в матрицы 6×6 (учитываем, что для ортотропного материала $S_{16} = S_{26} = S_{45} = 0$), то формулы (12) превратятся в указанные С. Г. Лехницким [20, 28].

Таким образом, зная перемещения берегов трещины и упругие свойства материала, можно вычислить КИН с помощью метода перемещений.

Асимптотические выражения для напряжений около вершины трещины в трехмерном случае, когда наблюдаются I, II и III моды разрушения, коэффициенты K_I, K_{II}, K_{III} определяются для изотропного материала соотношениями [22, 29]. Если рассматривать напряжения на продолжении линии роста трещины, в окрестности вершины трещины, т. е. при $\alpha = 0$, и выразить коэффициенты интенсивности напряжений через напряжения, то мы получаем для изотропного материала такие выражения:

$$\begin{aligned} K_I &= \sigma_{yy}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}, \\ K_{II} &= \sigma_{xy}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}, \\ K_{III} &= \sigma_{yz}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}. \end{aligned} \quad (13)$$

Асимптотические выражения для напряжений около вершины трещины в трехмерном случае, для анизотропного материала, в результате применения формализма Лехницкого, принимают следующий вид [23 – 25, 30, 31]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(r, \alpha) &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{\mu'_1 \mu'_2}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{\mu'_2}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{\mu'_1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right) + \\ &+ \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{\mu_2'^2}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{\mu_1'^2}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right), \\ \sigma_{yy}(r, \alpha) &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{\mu'_1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{\mu'_2}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right) + \\ &+ \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(r, \alpha) = & \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{\mu'_1 \mu'_2}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right) + \\ & + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\mu'_1 - \mu'_2} \left(\frac{\mu'_1}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_2 \sin \alpha}} - \frac{\mu'_2}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_1 \sin \alpha}} \right) \right), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\sigma_{xz}(r, \alpha) = -\frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{\mu'_3}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_3 \sin \alpha}} \right),$$

$$\sigma_{yz}(r, \alpha) = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{\mu'_3}{\sqrt{\cos \alpha + \mu'_3 \sin \alpha}} \right),$$

где $\sigma_{ij}(r, \alpha)$ – компоненты тензора напряжений в системе координат трещины.

Рассматривая выражения (14) при $\alpha = 0$ и выражая КИН через напряжения, мы получаем для анизотропного материала формулы, совпадающие с изотропным случаем:

$$\begin{aligned} K_I &= \sigma_{yy}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}, \\ K_{II} &= \sigma_{xy}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}, \\ K_{III} &= \sigma_{yz}(r, 0) \cdot \sqrt{2\pi r}. \end{aligned} \quad (15)$$

Таким образом, мы можем по напряжениям в окрестности вершины трещины находить КИН как для изотропного, так и анизотропного материалов, при этом полученные выражения будут одинаковыми. Стоит заметить, что, в случае использования формул (13) – (15), напряжения нужно преобразовать в систему координат, связанную с трещиной.

Вычисление матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ через упругие модули

В предыдущем разделе было показано, как находить КИН по перемещениям с использованием формулы (10) для анизотропного материала. Получим теперь явные выражения для корней уравнения 4-ой степени и матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ через упругие модули ортотропного материала в случае плоского напряженного состояния, когда трещина находится в плоскости $xу$. Рассмотрим сначала уравнение 4-ой степени (7), когда система координат трещины совпадает с системой координат материала:

$$S_{11}\mu^4 - 2S_{16}\mu^3 + (2S_{12} + S_{66})\mu^2 - 2S_{26}\mu + S_{22} = 0. \quad (16)$$

Подставляем коэффициенты S_{ij} для случая плоского напряженного состояния, умножаем на E_1 , и тогда, в силу справедливости уравнения (7), приходим к уравнению:

$$\mu^4 + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right) \mu^2 + \frac{E_1}{E_2} = 0. \quad (17)$$

Корни уравнения (17) зависят от упругих констант материала. Таким образом, существует два варианта корней уравнения (17).

Вариант 1. Если $\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right)^2 - 4 \frac{E_1}{E_2} < 0$, то корни выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= A + iB, \\ \mu_2 &= -A + iB, \end{aligned} \quad (18)$$

где $A = \frac{\sqrt{2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} - \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right)}}{2}$, $B = \frac{\sqrt{2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right)}}{2}$.

Вариант 2. Если $\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right)^2 - 4\frac{E_1}{E_2} \geq 0$, то корни выражаются как

$$\begin{aligned} \mu_1 &= i(b^* + a^*), \\ \mu_2 &= i(b^* - a^*), \end{aligned} \tag{19}$$

где $b^* = \frac{\sqrt{\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right) + 2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}}}}{2}$, $a^* = \frac{\sqrt{\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right) - 2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}}}}{2}$.

Чтобы найти корни уравнения, когда система координат трещины не совпадает с системой координат материала, нужно преобразовать найденные корни. При повороте системы координат на угол φ корни уравнения в исходной и повернутой системах координат связаны соотношениями [20]:

$$\begin{aligned} \mu'_1 &= \frac{\mu_1 \cos \varphi - \sin \varphi}{\cos \varphi + \mu_1 \sin \varphi}, \\ \mu'_2 &= \frac{\mu_2 \cos \varphi - \sin \varphi}{\cos \varphi + \mu_2 \sin \varphi}. \end{aligned} \tag{20}$$

Вариант 1. Если $\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right)^2 - 4\frac{E_1}{E_2} < 0$, то в результате подстановки выражения (18) в формулу (20) после преобразований получим:

$$\begin{aligned} \mu'_1 &= \frac{A \cos 2\varphi + \frac{A^2 + B^2 - 1}{2} \sin 2\varphi}{\cos^2 \varphi + A \sin 2\varphi + (A^2 + B^2) \sin^2 \varphi} + i \frac{B}{\cos^2 \varphi + A \sin 2\varphi + (A^2 + B^2) \sin^2 \varphi}, \\ \mu'_2 &= \frac{-A \cos 2\varphi + \frac{A^2 + B^2 - 1}{2} \sin 2\varphi}{\cos^2 \varphi - A \sin 2\varphi + (A^2 + B^2) \sin^2 \varphi} + i \frac{B}{\cos^2 \varphi - A \sin 2\varphi + (A^2 + B^2) \sin^2 \varphi}. \end{aligned} \tag{21}$$

Вариант 2. Если $\left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}\right)^2 - 4\frac{E_1}{E_2} \geq 0$, то в результате подстановки выражения (19) в формулу (20) после преобразований получим:

$$\begin{aligned} \mu'_1 &= \frac{[(b^* + a^*)^2 - 1] \sin \varphi \cos \varphi}{\cos^2 \varphi + (b^* + a^*)^2 \sin^2 \varphi} + i \frac{b^* + a^*}{\cos^2 \varphi + (b^* + a^*)^2 \sin^2 \varphi}, \\ \mu'_2 &= \frac{[(b^* - a^*)^2 - 1] \sin \varphi \cos \varphi}{\cos^2 \varphi + (b^* - a^*)^2 \sin^2 \varphi} + i \frac{b^* - a^*}{\cos^2 \varphi + (b^* - a^*)^2 \sin^2 \varphi}. \end{aligned} \tag{22}$$

Матрица $[\mathbf{B}]^{-1}$ определяется выражением (11). Упрощая выражения, с помощью которых вычисляются элементы матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{p_2 - p_1}{(\mu'_1 - \mu'_2)} &= S'_{16} - S'_{11} \cdot (\mu'_1 + \mu'_2), & \frac{q_2 - q_1}{(\mu'_1 - \mu'_2)} &= \frac{S'_{22}}{\mu'_1 \mu'_2} - S'_{12}, \\ \frac{\mu'_1 p_2 - \mu'_2 p_1}{(\mu'_1 - \mu'_2)} &= S'_{12} - S'_{11} \mu'_1 \mu'_2, & \frac{\mu'_1 q_2 - \mu'_2 q_1}{(\mu'_1 - \mu'_2)} &= S'_{22} \frac{\mu'_1 + \mu'_2}{\mu'_1 \mu'_2} - S'_{26}. \end{aligned} \quad (23)$$

Подставляя выражения (21) в (23) для комплексных корней уравнения и учитывая, что

$$E_1 S'_{11} = 1 - A^2 \sin^2 2\varphi + \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} - 1 \right)^2 \sin^4 \varphi + 2 \sin^2 \varphi \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} - 1 \right),$$

получаем матрицу влияния $[\mathbf{B}]^{-1}$ в явном виде:

$$[\mathbf{B}]^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi & \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right) & 0 \\ \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \right) & \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{G_{13} G_{23}} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где $B = \frac{\sqrt{2 \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right)}}{2}$, φ – угол поворота системы координат материала в систему

координат трещины.

Подставляя равенства (22) в (23) для комплексных корней уравнения (16) и учитывая, что

$$E_1 S'_{11} = (\cos^2 \varphi + B_1^2 \sin^2 \varphi)(\cos^2 \varphi + A_1^2 \sin^2 \varphi),$$

получаем выражения для матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$, которые совпадают с формулами (24).

Таким образом, вид матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ для варианта 1 корней (21) уравнения (16) совпадает с видом (24) матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ для варианта 2 корней (22) уравнения (16).

КИН при плоском напряженном состоянии для ортотропного материала вычисляется по перемещениям на основе следующих соотношений:

$$\begin{aligned} K_I &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \left[\frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi \cdot u_x + \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right) \cdot u_y \right], \\ K_{II} &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \left[\frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \right) \cdot u_x + \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi \cdot u_y \right], \\ K_{III} &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot \sqrt{G_{13} G_{23}} \cdot u_z, \end{aligned} \quad (25)$$

где $B = \frac{\sqrt{2 \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right)}}{2}$.

Таким образом, матрица $[\mathbf{B}]^{-1}$ – одна и та же для любых значений упругих свойств ортотропного материала. Стоит заметить, что в формуле (25) каждый КИН (K_I и K_{II}) зависит от обеих компонент перемещений u_x и u_y .

Важным для практики случаем является вычисление КИН для монокристаллических лопаток газовых турбин, у которых наблюдается кубическая симметрия упругих свойств. В этом случае формулы (25) упрощаются следующим образом ($E_1 = E_2 = E$, $G_{12} = G_{13} = G_{23} = G$):

$$\begin{aligned} K_I &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot \frac{E}{\sqrt{2 + \left(\frac{E}{G} - 2\nu\right)}} \cdot u_y, \\ K_{II} &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot \frac{E}{\sqrt{2 + \left(\frac{E}{G} - 2\nu\right)}} \cdot u_x, \\ K_{III} &= \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \cdot G \cdot u_z. \end{aligned} \tag{26}$$

Каждый КИН зависит только от одной компоненты перемещения, в отличие от случая ортотропного материала.

Рассмотрим свойства матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$.

Свойство 1. Из вида матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ следует, что при $E_1 = E_2$ (например, в случае кубической симметрии) наблюдается разделение мод, т. е. K_I зависит только от u_y , K_{II} зависит только от u_x , как в случае изотропного материала, однако выражения в случае кубической симметрии – другие, по сравнению с изотропным материалом.

Свойство 2. Так же в случае $E_1 = E_2$ (например, для кубической симметрии), коэффициенты матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ одинаковы для любого угла φ , т. е. не зависят от него, как в случае изотропного материала.

Свойство 3. Элемент матрицы $(B^{-1})_{33}$ – постоянный и не зависит от угла φ .

Свойство 4. В случаях кубической симметрии материала и изотропного материала, K_I линейно зависит от u_y с таким же коэффициентом пропорциональности, с каким K_I зависит от u_x .

Свойство 5. С целью анализа степени влияния u_x или u_y на K_I и K_{II} для ортотропного материала рассмотрим предельные переходы:

$$\begin{aligned} \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow 0} \frac{(B^{-1})_{12}}{(B^{-1})_{11}} &= \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi}{\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi} = \operatorname{ctg} \varphi, & \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow \infty} \frac{(B^{-1})_{12}}{(B^{-1})_{11}} &= \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow \infty} \frac{\left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} - 1\right) \sin^2 \varphi + 1}{\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi} = -\operatorname{tg} \varphi, \\ \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow 0} \frac{(B^{-1})_{21}}{(B^{-1})_{22}} &= \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi}{\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi} = \operatorname{tg} \varphi, & \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow \infty} \frac{(B^{-1})_{21}}{(B^{-1})_{22}} &= \lim_{\frac{E_1}{E_2} \rightarrow \infty} \frac{\left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} - 1\right) \cos^2 \varphi + 1}{\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi} = -\operatorname{ctg} \varphi. \end{aligned}$$

Представленные выше результаты доказывают, что степень влияния u_x или u_y на K_I и K_{II} зависит от отношения модулей Юнга E_1 / E_2 и угла поворота φ .

Свойство 6. Из выражений (25) видно, что чем ближе корень $\sqrt{E_1 / E_2}$ к единице, тем меньше элементы $(B^{-1})_{11}$, $(B^{-1})_{22}$ по сравнению с элементами $(B^{-1})_{12}$, $(B^{-1})_{21}$. И тогда значение K_I в большей степени определяется значением u_y , а значение K_{II} в большей степени определяется значением u_x .



Анализ приведенных выше соотношений показывает, что степень влияния u_y или u_x зависит от значения угла φ .

Свойство 7. Рассмотрим определитель матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$:

$$\det [\mathbf{B}]^{-1} = \sqrt{G_{13}G_{23}} \cdot \frac{E_1 E_2}{4B^2} \cdot \left[\left(1 + \frac{E_1}{E_2} - 2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi - \frac{E_1}{E_2} \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi - \right. \\ \left. - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \sin^4 \varphi - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \cos^4 \varphi \right] = -\sqrt{G_{13}G_{23}} \frac{E_1 \sqrt{E_1 E_2}}{4B^2}.$$

Из вида определителя матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ следует, что нельзя однозначно вычислить КИН по перемещениям, если

$$B = \frac{\sqrt{2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right)}}{2} = 0.$$

Отсюда следует, что

$$2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right) = 0, \quad \frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} < 0, \quad \frac{E_1}{G_{12}} + 2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} < 1.$$

Это соответствует варианту значений корней уравнения 4-ой степени, когда они являются вещественными, что делает все элементы матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ равными нулю, однако доказано, что уравнение (16) не может иметь вещественных корней [15]. Но если соотношение упругих констант таково, что

$$2\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right) \approx 0$$

или E_1 достаточно мало, то могут возникнуть проблемы при численном вычислении матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ и вычислении КИН.

Для демонстрации других свойств элементов матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ примем упругие свойства ортотропного материала равными приведенным в табл. 1 и построим график изменения элементов матрицы в зависимости от угла поворота трещины φ (рис. 2).

Таблица 1

Упругие свойства ортотропного материала, использованные в расчетах

Модуль, МПа		Коэффициент Пуассона
Юнга	сдвига	
$E_1 = 20000$	$G_{12} = 13000$	$\nu_{12} = 0,30$
$E_2 = 15000$	$G_{23} = 11000$	$\nu_{23} = 0,25$
$E_3 = 10000$	$G_{31} = 8000$	$\nu_{31} = 0,20$

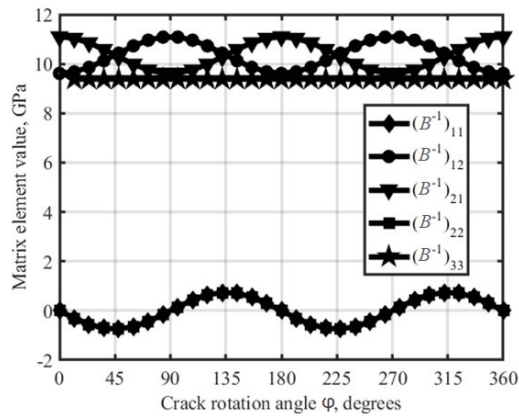


Рис. 2. Зависимости значений элементов матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ ортотропного материала от угла поворота трещины относительно его осей

Свойство 8. На рис. 2 видно, что все элементы матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$, за исключением постоянного элемента $(B^{-1})_{33}$, изменяются периодически с периодом $T = \pi$.

Периодически элементы матрицы $(B^{-1})_{11}$, $(B^{-1})_{22}$ обращаются в нуль, и коэффициент K_I зависит только от u_y , а K_{II} зависит только от u_x при значениях угла $\varphi = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \dots$ для ортотропного материала (так же, как для случаев кубической симметрии и изотропного материала).

Графики элементов матрицы $(B^{-1})_{12}$, $(B^{-1})_{21}$ сдвинуты друг относительно друга на угол $\varphi = \pi/2$.

Свойство 9. Для анализа знакоопределенности матрицы вычислим главные миноры матрицы:

$$\text{minor } \Delta_1 = \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi$$

может быть как больше, так и меньше нуля;

$$\text{minor } \Delta_2 = -\frac{E_1 \sqrt{E_1 E_2}}{4B^2} < 0, \quad \Delta_3 = -\sqrt{G_{13} G_{23}} \frac{E_1 \sqrt{E_1 E_2}}{4B^2} < 0.$$

Отсюда видно, что матрица $[\mathbf{B}]^{-1}$ не является ни положительно, ни отрицательно определенной.

Свойство 10. Собственные числа матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ определяются как корни уравнения

$$\begin{vmatrix} \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi - \lambda & \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right) & 0 \\ \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{2B} \left(\sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \right) & \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{4B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \right) \sin 2\varphi - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{G_{13} G_{23}} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

В результате вычисления определителя получаем кубическое уравнение относительно λ :

$$\left(\sqrt{G_{13}G_{23}} - \lambda\right) \cdot \left[\lambda^2 - \lambda \frac{\sqrt{E_1E_2}}{B} \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi - \frac{E_1\sqrt{E_1E_2}}{4B^2}\right] = 0. \quad (27)$$

Разделяя множители и вычисляя дискриминант, находим корни уравнения:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{\sqrt{E_1E_2}}{2B} \left[\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi + \sqrt{\left(1 + \frac{E_1}{E_2}\right) \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi + \frac{E_1}{E_2} (\sin^4 \varphi + \cos^4 \varphi)} \right], \\ \lambda_2 &= \frac{\sqrt{E_1E_2}}{2B} \left[\left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}\right) \sin \varphi \cos \varphi - \sqrt{\left(1 + \frac{E_1}{E_2}\right) \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi + \frac{E_1}{E_2} (\sin^4 \varphi + \cos^4 \varphi)} \right], \\ \lambda_3 &= \sqrt{G_{13}G_{23}}. \end{aligned} \quad (28)$$

Таким образом, одно собственное число матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ вообще не зависит от угла φ , а другие два являются периодическими функциями от угла φ с периодом π .

Верификация методов вычисления КИН для трещин в анизотропных материалах с помощью метода конечных элементов

Тестирование метода перемещений и полученных выражений для матрицы $[\mathbf{B}]^{-1}$ проводилось на основе результатов КЭ-решения краевой задачи и вычисления КИН для случая одиночной наклонной трещины в бесконечной плоскости для смешанной моды разрушения (при наличии мод K_I и K_{II}). Рассматривалась одиночная трещина в бесконечной плоскости под углом φ к оси анизотропии материала, ортогональной направлению действия нагрузки (рис. 3). Задача решалась в двумерной постановке, в предположении плоского напряженного состояния.

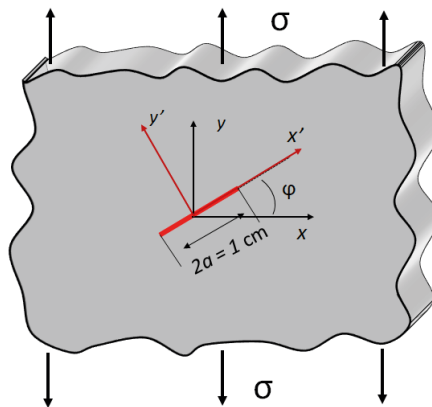


Рис. 3. Схема, отражающая постановку задачи об одноосном растяжении плоскости с наклонной трещиной (выделена красным цветом).

Обозначения те же, что на рис. 1

Для данной задачи известно аналитическое решение для КИН [23]:

$$\begin{aligned} K_I &= \sigma \sqrt{\pi a} \cdot \cos^2 \varphi, \\ K_{II} &= \sigma \sqrt{\pi a} \cdot \sin \varphi \cdot \cos \varphi. \end{aligned} \quad (29)$$

Аналитическое решение для бесконечной плоскости не зависит от вида анизотропии и значений упругих модулей материала. Задача решалась в КЭ-комплексе PANTOCRATOR [32], в котором было запрограммировано вычисление КИН для изотропного и анизотроп-

ного материалов с помощью метода перемещений (см. формулы (8), (10)) и напряжений (см. формулы (13) и (15)). В расчетах использовались квадратичные 8-узловые конечные элементы.

Были построены КЭ-модели для сравнения численных решений с аналитическим при разных значениях угла φ (угол ориентации трещины по отношению к осям ортотропии материала). На рис. 4 представлена в качестве примера КЭ-модель со 126 тыс. степенями свободы и 80 элементами на берегу трещины для случая квадратной пластины конечных размеров и угла наклона трещины $\varphi = 45^\circ$.

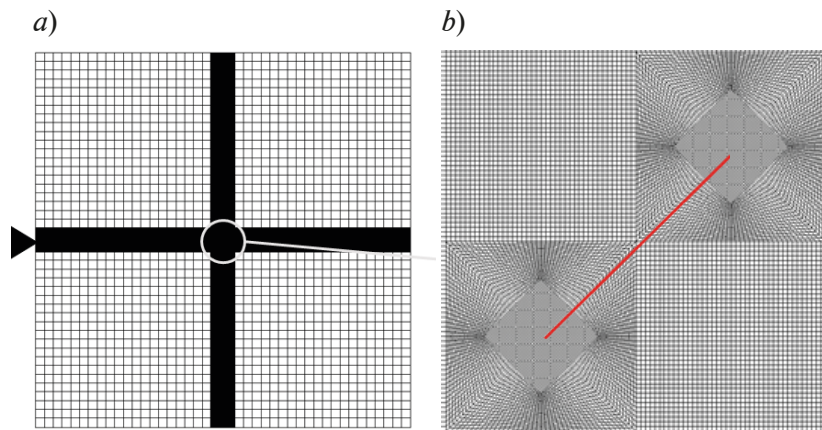


Рис. 4. Конечно-элементная модель пластины с наклонной трещиной (a) и ее центральный фрагмент (b)

Длина расчетной области была выбрана равной 22 см, ширина расчетной области – также 22 см; длина трещины – 1 см, что является приближением для моделирования поведения трещины в бесконечной области. Пластина была нагружена на верхней грани напряжением $\sigma_{yy} = 100$ МПа и закреплена на нижней грани (для исключения твердотельных перемещений). Использованные в расчетах упругие свойства материалов представлены в табл. 2.

Таблица 2

Упругие свойства материалов для трех вариантов их симметрии, использованные в КЭ-расчетах

Материал	Модуль, МПа		Коэффициент Пуассона
	Юнга	сдвига	
Изотропный	$E = 20000$	$G = \frac{E}{2(1+\nu)} = 7692,3$	$\nu = 0,30$
С кубической симметрией свойств	$E = 20000$	$G = 11000$	$\nu = 0,30$
Ортотропный	$E_1 = 20000$	$G_{12} = 13000$	$\nu_{12} = 0,30$
	$E_2 = 15000$	$G_{23} = 11000$	$\nu_{23} = 0,25$
	$E_3 = 10000$	$G_{31} = 8000$	$\nu_{31} = 0,20$

На рис. 5 представлено сравнение численных результатов для КИН, полученных методами перемещений и напряжений, с аналитическим решением для трех вариантов материала: изотропного, ортотропного и с кубической симметрией.

В табл. 3 представлены значения K_I и K_{II} , соответствующие рис. 5. Следует отметить, что максимальная погрешность δ_{\max} для метода перемещений (0,79 %) превосходит таковую для метода напряжений (0,42 %); погрешность для изотропного материала минимальна, для ортотропного максимальна. Однако во всех рассмотренных случаях погрешность не превосходит 0,8 %, что указывает на высокую точность рассмотренных методов.

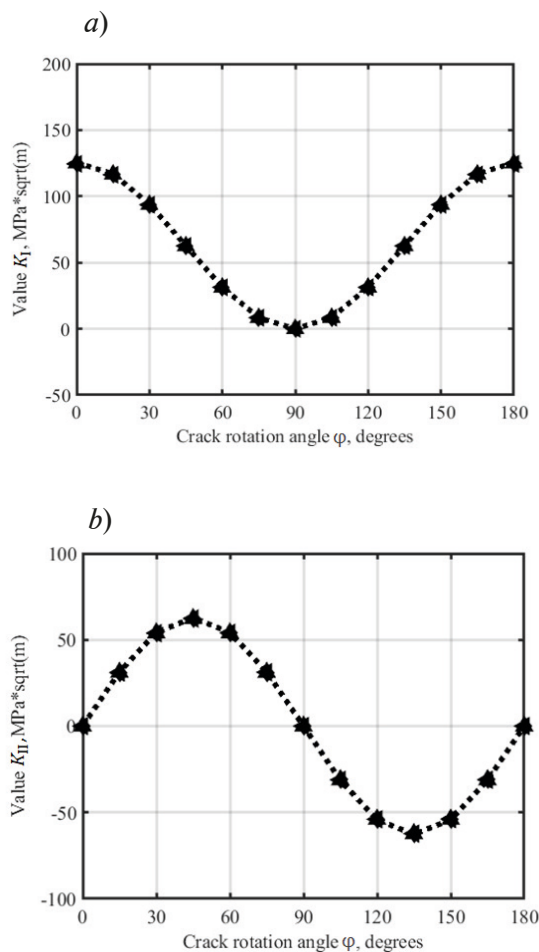


Рис. 5. Сравнение численных решений (символы) для КИН K_I (a) и K_{II} (b), полученных методами перемещений и напряжений, с аналитическими решениями (пунктиры). Приведены данные для изотропного (\blacktriangle), ортотропного (\blacktriangleleft) материалов и материала с кубической симметрией (\blacklozenge)

Рис. 6 показывает различия в раскрытии трещины для разных вариантов анизотропии материала для случая угла наклона трещины $\varphi = 60^\circ$.

Результаты КЭ-расчетов показывают, что из трех рассмотренных случаев симметрии упругих свойств материала, в изотропном случае трещина раскрывается шире всех, в ортотропном – меньше всех, при прочих равных условиях, заданных конкретными значениями упругих параметров.

Таблица 3

**Сравнение аналитического решения с численными
для трех типов материалов**

φ, град	Аналитическое решение		Численное решение методом					
			перемещений			напряжений		
	K_I	K_{II}	K_I	K_{II}	δ_{\max}	K_I	K_{II}	δ_{\max}
	МПа·м ^{1/2}			%			МПа·м ^{1/2}	
<i>Для изотропного материала</i>								
0	125,33	0	124,96	0,0005	0,29	125,05	0,0003	0,22
30	93,99	54,27	93,70	53,93	0,62	93,93	54,26	0,07
60	31,33	54,27	31,22	53,92	0,64	31,30	54,25	0,10
90	0	0	< 0,0001	0,0002	0,02	< 0,0001	< 0,0001	< 0,01
120	31,33	-54,27	31,22	-53,91	0,65	31,28	-54,23	0,15
150	93,99	-54,27	93,70	-53,93	0,62	93,93	-54,26	0,07
180	125,33	0	124,96	0,0005	0,29	125,05	0,0003	0,22
<i>Для материала с кубической симметрией</i>								
0	125,33	0	124,77	0,004	0,45	125,07	0,003	0,20
30	93,99	54,27	93,68	53,89	0,70	93,90	54,22	0,10
60	31,33	54,27	31,26	53,94	0,60	31,34	54,29	0,04
90	0	0	< 0,0001	0,0002	0,02	< 0,0001	< 0,0001	< 0,01
120	31,33	-54,27	31,25	-53,94	0,60	31,31	-54,29	0,07
150	93,99	-54,27	93,68	-53,89	0,70	93,90	-54,22	0,10
180	125,33	0	124,77	0,004	0,45	125,07	0,003	0,20
<i>Для ортотропного материала</i>								
0	125,33	0	124,50	0,006	0,66	124,80	0,007	0,42
30	93,99	54,27	93,61	53,84	0,79	93,83	54,23	0,18
60	31,33	54,27	31,31	53,95	0,58	31,40	54,30	0,20
90	0	0	< 0,0001	0,0002	0,02	< 0,0001	< 0,0001	< 0,01
120	31,33	-54,27	31,29	-53,95	0,58	31,35	-54,30	0,08
150	93,99	-54,27	93,61	-53,84	0,79	93,83	-54,23	0,18
180	125,33	0	124,50	0,006	0,66	124,80	0,0068	0,42

Обозначения: φ – угол наклона трещины к оси x; δ_{\max} – максимальная относительная погрешность одного из пары K_I и K_{II} (коэффициенты интенсивности напряжений для I и II моды разрушения); она берется относительно результата аналитического решения.

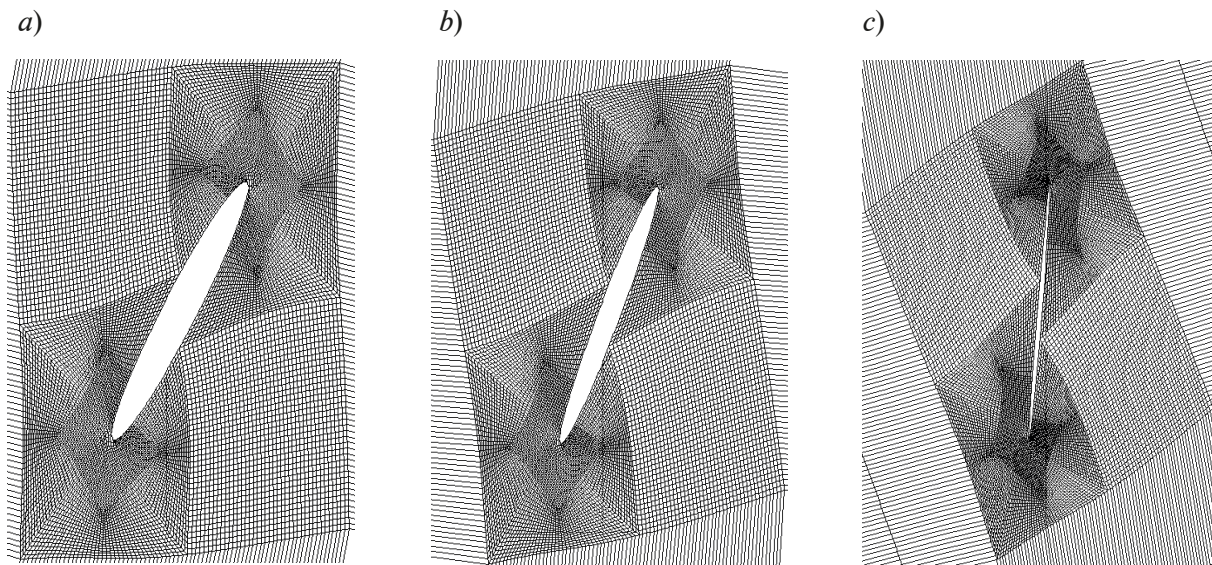


Рис. 6. Сравнение результатов КЭ-расчетов раскрытия трещины (угол начального наклона $\varphi = 60^\circ$) для материалов с различной симметрией упругих свойств: изотропного (a), с кубической симметрией (b) и ортотропного (c). Масштаб перемещений увеличен в 60 раз

Выводы

Для случая плоского напряженного состояния в работе были получены в явной форме выражения для корней уравнения 4-ой степени, определяющие элементы матрицы взаимного влияния трех компонент вектора относительного смещения берегов трещины на три коэффициента интенсивности напряжений $[B]^{-1}$ через упругие константы материалов, обладающих ортотропией либо кубической симметрией. Произведено систематическое исследование свойств матрицы взаимного влияния $[B]^{-1}$. Установлено отсутствие смешанности мод для материала с кубической симметрией.

Помимо этого, были выполнены расчеты значений КИН для одиночной наклонной трещины в плоском напряженном состоянии с помощью двух численных методов: экстраполяции перемещений и напряжений в вершину трещины для разных ориентаций трещины в плоскости относительно осей анизотропии материала. Результаты численных решений хорошо согласуются с аналитическим решением для изотропного материала, материала с кубической симметрией и ортотропного (погрешность во всех случаях не превышала 0,8 %). При этом установлено, что метод вычисления КИН через экстраполяцию напряжений в вершину трещины обладает более высокой точностью, чем метод, основанный на экстраполяции перемещений.

Конечно-элементное моделирование пластины с наклонной трещиной показало, что при равенстве максимальных значений модуля Юнга трещина демонстрирует максимальное раскрытие берегов в изотропном материале, а минимальное раскрытие наблюдается в случае ортотропного материала.

Рассмотренные методы экстраполяции перемещений и напряжений могут быть рекомендованы для оценки КИН при моделировании роста трещин и расчета трещиностойкости монокристаллических рабочих лопаток газовых турбин.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шалин Р. Е., Светлов И. Л., Качалов Е. Б., Толораия В. Н., Гаврилин В. С. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов. М.: Машиностроение. 1997. 336 с.
2. Wilson B. C., Hickman J. A., Fuchs G. E. The effect of solution heat treatment on a single-crystal Ni-based superalloy // *The Journal of the Minerals, Metals & Materials Society*. 2003. Vol. 55. No. 3. Pp. 35–40.
3. Ходинев И. А., Монин С. А. Анизотропия характеристик малоциклового усталости монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов // *Труды ВИАМ (Всероссийский НИИ авиационных материалов)*. 2020. № 10 (92). С. 97–105.
4. Гецов Л. Б. Материалы и прочность деталей газовых турбин. В 2 тт. Т. 1. Рыбинск: Издат. дом «Газотурбинные технологии», 2010. 605 с.
5. Getsov L. B., Semenov A. S., Ignatovich I. A. Thermal fatigue analysis of turbine discs on the base of deformation criterion // *International Journal of Fatigue*. 2017. Vol. 97. April. Pp. 88–97.
6. Wang R., Zhang B., Hu D., Jiang K., Mao J., Jing F. A critical-plane-based thermomechanical fatigue lifetime prediction model and its application in nickel-based single-crystal turbine blades // *Materials at High Temperatures*. 2019. Vol. 36. No. 4. Pp. 325–334.
7. Глотка А. А., Гайдук С. В. Прогнозирование свойств монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов // *Наука и прогресс транспорта. Вестник Днепропетровского национального университета железнодорожного транспорта*. 2019. № 2 (80). С. 91–100.
8. Бондаренко Ю. А., Колодяжный М. Ю., Ечин А. Б., Нарский А. Р. Направленная кристаллизация, структура и свойства естественного композита на основе эвтектики Nb-Si на рабочие температуры до 1350 °С для лопаток ГТД // *Труды ВИАМ*. 2018. № 1 (61). С. 3–14.
9. Бондаренко Ю. А. Тенденция развития высокотемпературных металлических материалов и технологий при создании современных авиационных газотурбинных двигателей // *Авиационные материалы и технологии*. 2019. № 2 (55). С. 3–11.
10. Семенов А. С., Грищенко А. И., Колотников М. Е., Гецов Л. Б. Конечный элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин Ч. 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров // *Вестник УГАТУ (Уфимский государственный авиационный технический университет)*. 2019. Т. 23. № 1 (83). С. 70–81.
11. Семенов А. С., Грищенко А. И., Колотников М. Е., Гецов Л. Б. Конечный элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин. Ч. 2. Результаты расчетов // *Вестник УГАТУ*. 2019. Т. 23. № 2 (84). С. 61–74.
12. Гецов Л. Б., Семенов А. С., Бессчетнов В. А., Грищенко А. И., Семёнов С. Г. Методика определения длительной прочности охлаждаемых лопаток из монокристаллических жаропрочных сплавов // *Теплоэнергетика*. 2017. № 4. С. 48–56.
13. Гецов Л. Б., Михайлов В. Е., Семенов А. С., Кривоносова В. В., Ножницкий Ю. А., Блинник Б. С., Магеррамова Л. А. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Ч. 1. Поликристаллические материалы // *Газотурбинные технологии*. 2011. № 7. С. 24–30.
14. Гецов Л. Б., Михайлов В. Е., Семенов А. С., Кривоносова В. В., Ножницкий Ю. А., Блинник Б. С., Магеррамова Л. А. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Ч. 2. Монокристаллические материалы // *Газотурбинные технологии*. 2011. № 8. С. 18–25.
15. Кузьмина Н. А., Пьянкова Л. А. Контроль кристаллографической ориентации монокристаллических отливок никелевых жаропрочных сплавов методом рентгеновской дифрактометрии // *Труды ВИАМ*. 2019. № 12 (84). С. 11–19.
16. Semenov A., Semenov S., Nazarenko A., Getsov L. Computer simulation of fatigue, creep and thermal-fatigue cracks propagation in gas-turbine blades // *Materials and Technology*. 2012. Vol. 46. No. 3. Pp. 197–203.
17. Семенов А. С., Семенов С. Г., Гецов Л. Б. Методы расчетного определения скорости роста трещин усталости, ползучести и термоусталости в поли- и монокристаллических лопатках ГТУ // *Проблемы прочности*. 2015. № 2. С. 61–87.
18. Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B. Coupled thermo-electro-mechanical modeling of thermal fatigue of single-crystal corset samples // *Materials Physics and Mechanics*. 2019. Vol. 42. No. 3. Pp. 296–310.



19. **Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B.** Crystallographic orientation, delay time and mechanical constants influence on thermal fatigue strength of single-crystal nickel superalloys // *Materials Physics and Mechanics*. 2020. Vol. 44. No. 1. Pp. 125–136.
20. **Лехницкий С. Г.** Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977. 416 с.
21. **Мартынов Н. И.** Комплексная форма закона Гука анизотропного упругого тела // *Известия РАН. Механика твердого тела*. 2020. № 4. С. 71–95.
22. **Качанов Л. М.** Основы механики разрушения. М.: Наука, 1974. С. 223–226.
23. **Sih G. C., Paris P. C., Irwin G. R.** On cracks in rectilinearly anisotropic bodies // *International Journal of Fracture Mechanics*. 1965. Vol. 1. No. 3. Pp. 189–203.
24. **Judt P. O., Ricoeur A., Linek G.** Crack path prediction in rolled aluminum plates with fracture toughness orthotropy and experimental validation // *Engineering Fracture Mechanics*. 2015. Vol. 138. April. Pp. 33–48.
25. **Banks-Sills L., Hershkovitz I., Wawrzynek P. A., Eliasi R., Ingraffea A. R.** Methods for calculating stress intensity factors in anisotropic materials: Part I: $z = 0$ is a symmetric plane // *Engineering Fracture Mechanics*. 2005. Vol. 72. No. 15. Pp. 2328–2358.
26. **Semenov S. G., Semenov A. S., Getsov L. B., Melnikov B. E.** Application of linear and nonlinear fracture mechanics criteria for crack propagation analysis in single crystal bodies // *Proceedings of XLI International Summer School –Conference “Advanced Problems in Mechanics (APM-2013)” Russia, St. Petersburg, July 2–6, 2013*. Pp. 75–82.
27. **Ranjan S., Arakere N. K.** A fracture-mechanics-based methodology for fatigue life prediction of single crystal nickel-based superalloys // *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 2008. Vol. 130. No. 3. P. 032501.
28. **Khansari N. M., Fakoor M., Berto F.** Probabilistic micromechanical damage model for mixed-mode I/II fracture investigation of composite materials // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2019. Vol. 99. February. Pp. 177–193.
29. **Cao J., Li F., Ma H., Sun Z.** Study of anisotropic crack growth behavior for aluminum alloy 7050-T7451 // *Engineering Fracture Mechanics*. 2018. Vol. 196. 1 June. Pp. 98–112.
30. **Fakoor M., Shavsavar S.** The effect of T-stress on mixed mode I/II fracture of composite materials: Reinforcement isotropic solid model in combination with maximum shear stress theory // *International Journal of Solids and Structures*. 2021. Vol. 229. 15 October. P. 111145.
31. **Fakoor M., Farid H. M.** Mixed-mode I/II fracture criterion for crack initiation assessment of composite materials // *Acta Mechanica*. 2019. Vol. 230. No. 1. Pp. 281–301.
32. **Семенов А. С.** PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // *Труды V-ой Международной конференции «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций»*. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. С. 466–480.

REFERENCES

1. **Shalin R. E., Svetlov I. L., Kachalov E. B., et al.**, Monokristally nikelovykh zharoprochnykh splavov [Single crystals of nickel heat-resistant alloys], Mashinostroyeniye, Moscow, 1997 (in Russian).
2. **Wilson B. C., Hickman J. A., Fuchs G. E.**, The effect of solution heat treatment on a single-crystal Ni-based superalloy, *JOM*. 55 (3) (2003) 35–40.
3. **Hodinev I. A., Monin S. A.**, Anisotropy of low cycle fatigue characteristics of single-crystal heat-resistant nickel alloys, *Proceedings of VIAM*. (10 (92)) (2020) 97–105 (in Russian).
4. **Getsov L. B.**, Materialy i prochnost detaley gazovykh turbin [Materials and strength of gas turbine parts], in 2 Vols., Vol. 1, Gas Turbine Technologies Publishing, Rybinsk, 2010 (in Russian).
5. **Getsov L. B., Semenov A. S., Ignatovich I. A.**, Thermal fatigue analysis of turbine discs on the base of deformation criterion, *Int. J. Fatig.* 97 (April) (2017) 88–97.
6. **Wang R., Zhang B., Hu D., et al.**, A critical-plane-based thermomechanical fatigue lifetime prediction model and its application in nickel-based single-crystal turbine blades, *Mater. High Temperat.* 36 (4) (2019) 325–334.
7. **Glotka A. A., Gayduk S. V.**, Prediction of the properties of single-crystal heat-resistance nickel alloys, *Science & Progress of Transport. Bulletin of Dnepropetrovsk National University of Railway Transport*. (2(80)) (2019) 91–100 (in Russian).

8. **Bondarenko Yu. A., Kolodyazhny M. Yu., Echin A. B., Narskiy A. R.,** Directional solidification, structure and properties of natural composite based on eutectic Nb-Si at working temperatures up to 1350 °C for the blades of gas turbine engines, *Proceedings of VIAM.* (1 (61)) (2018) 3–14 (in Russian).
9. **Bondarenko Yu. A.,** Trends in the development of high-temperature metal materials and technologies in the production of modern aircraft gas turbine engines, *Aviation Materials and Technologies.* (2 (55)) (2019) 3–11 (in Russian).
10. **Semenov A. S., Grishchenko A. I., Kolotnikov M. E., Getsov L. B.,** Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades, Part 1. Material models, fracture criteria, identification, *Vestnik UGATU [USATU Bulletin].* 23 (1 (83)) (2019) 70–81 (in Russian).
11. **Semenov A. S., Grishchenko A. I., Kolotnikov M. E., Getsov L. B.,** Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades, Part 2. Results of computations, *Vestnik UGATU [USATU Bulletin].* 23 (2 (84)) (2019) 61–74 (in Russian).
12. **Getsov L. B., Semenov A. S., Besschetnov V. A., et al.,** Long-term strength determination for cooled blades made of monocrystalline superalloys, *Therm. Eng.* 64 (4) (2017) 280–287.
13. **Getsov L. B., Mikhaylov V. E., Semenov A. S., et al.,** Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok GTU. Chast 1. Polikristallicheskiye materialy [Design determination of the work life of operating and guide blades of gas-turbine installations. Part 1. Polycrystalline materials], *Gas Turbine Technologies.* (7) (2011) 24–30 (in Russian).
14. **Getsov L. B., Mikhaylov V. E., Semenov A. S., et al.,** Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok GTU. Chast 2. Monokristallicheskiye materialy [Computational determination of the work life of operating and guide blades of gas-turbine units. Part 1. Monocrystalline materials], *Gas Turbine Technologies.* (8) (2011) 18–25 (in Russian).
15. **Kuzmina N. A., Pyankova L. A.,** Control of crystallographic orientation of monocrystalline nickel castings heat-resistant alloys by X-ray diffractometry, *Proceedings of VIAM.* (12 (84)) (2019) 11–19 (in Russian).
16. **Semenov A. S., Semenov S. G., Nazarenko A. A., Getsov L. B.,** Computer simulation of fatigue, creep and thermal fatigue cracks propagation in gas turbine blades, *Mater. Technol.* 46 (3) (2012) 197–203.
17. **Semenov A. S., Semenov S. G., Getsov L. B.,** Methods of computational determination of growth rates of fatigue, creep, and thermal fatigue cracks in poli- and monocrystalline blades of gas-turbine units, *Strength Mater.* 47 (2) (2015) 268–290.
18. **Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B.,** Coupled thermo-electro-mechanical modeling of thermal fatigue of single-crystal corset samples, *Mater. Phys. Mech.* 42 (3) (2019) 296–310.
19. **Savikovskii A. V., Semenov A. S., Getsov L. B.,** Crystallographic orientation, delay time and mechanical constants influence on thermal fatigue strength of single-crystal nickel superalloys, *Mater. Phys. Mech.* 44 (1) (2020) 125–136.
20. **Lekhnitsky S. G.,** *Teoriya uprugosti anizotropnogo tela [Theory of elasticity of an anisotropic elastic body],* Nauka, Moscow, 1977 (in Russian).
21. **Martynov N. I.,** Complex form of Hooke's law of anisotropic elastic body, *Mechanics of Solids.* 55 (4) (2020) 514–535.
22. **Kachanov M. L.,** *Osnovy mekhaniki razrusheniya [Fundamentals of fracture mechanics].* Nauka, Moscow, 1974, Pp. 223–226 (in Russian).
23. **Sih G. C., Paris P. C., Irwin G. R.,** On cracks in rectilinearly anisotropic bodies, *Int. J. Fract.* 1 (3) (1965) 189–203.
24. **Judt P. O., Ricoeur A., Linek G.,** Crack path prediction in rolled aluminum plates with fracture toughness orthotropy and experimental validation, *Eng. Fract. Mech.* 138 (April) (2015) 33–48.
25. **Banks-Sills L., Hershkovitz I., Wawrzynek P. A., et al.,** Methods for calculating stress intensity factors in anisotropic materials: Part I: $z = 0$ is a symmetric plane, *Eng. Fract. Mech.* 72 (15) (2005) 2328–2358.
26. **Semenov S. G., Semenov A. S., Getsov L. B., et al.,** Application of linear and nonlinear fracture mechanics criteria for crack propagation analysis in single crystal bodies, *Proc. XLI Int. Summer School-Conf. "Advanced Problems in Mechanics (APM-2013)"* St. Petersburg, Russia, July 2–6 (2013) 75–82.
27. **Ranjan S., Arakere N. K.,** A fracture-mechanics-based methodology for fatigue life prediction of single crystal nickel-based superalloys, *J. Eng. Gas Turbines Power.* 130 (3) (2008) 032501.
28. **Khansari N. M., Fakoor M., Berto F.,** Probabilistic micromechanical damage model for mixed-



mode I/II fracture investigation of composite materials, *Theor. Appl. Fract. Mech.* 99 (February) (2019) 177–193.

29. **Cao J., Li F., Ma H., Sun Z.**, Study of anisotropic crack growth behavior for aluminum alloy 7050-T7451, *Eng. Fract. Mech.* 196 (1 June) (2018) 98–112.

30. **Fakoor M., Shavsavar S.**, The effect of T-stress on mixed mode I/II fracture of composite materials: Reinforcement isotropic solid model in combination with maximum shear stress theory, *Int. J. Solids & Struct.* 229 (15 October) (2021) 111145.

31. **Fakoor M., Farid H. M.**, Mixed-mode I/II fracture criterion for crack initiation assessment of composite materials, *Acta Mechanica.* 230 (1) (2019) 281–301.

32. **Semenov A. S.**, PANTOCRATOR – konechno-elementnyy programmnyy kompleks, oriyentirovanny na resheniye nelineynykh zadach mekhaniki [PANTOCRATOR – finite-element program specialized on the solution of non-linear problems of solid body mechanics], In: *Proc. The V-th Int. Conf. "Scientific and Engineering Problems of Reliability and Service Life of Structures and Methods of Their Decision"*, St. Petersburg Polytechnical University Publishing, St. Petersburg (2003) 466–480.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САВИКОВСКИЙ Артем Викторович – аспирант кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
savikovskij.av@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-1710-1943

СЕМЕНОВ Артем Семенович – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой сопротивления материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Semenov.Artem@googlemail.com
ORCID: 0000-0002-8225-3487

THE AUTHORS

SAVIKOVSKII Artem V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
savikovskij.av@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-1710-1943

SEMENOV Artem S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Semenov.Artem@googlemail.com
ORCID: 0000-0002-8225-3487

Статья поступила в редакцию 20.01.2022. Одобрена после рецензирования 22.04.2022. Принята 22.04.2022.

Received 20.01.2022. Approved after reviewing 22.04.2022. Accepted 22.04.2022.

Научная статья

УДК 531.332

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15211>

ДВУХФАКТОРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ В ЗАДАЧЕ О БРАХИСТОХРОНЕ

А. С. Смирнов^{1,2} ✉, С. В. Суворов³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия;

² Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
г. Санкт-Петербург, Россия;

³ Центральное конструкторское бюро транспортного машиностроения,
г. Тверь, Россия

✉ smirnov.alexey.1994@gmail.com

Аннотация. В статье предлагается новая модификация известной задачи о брахистохроме. Введен совместный учет минимизаций времени движения и длины траектории в их функциональной взаимосвязи. Построен двухфакторный критерий оптимизации (ДКО) в виде произведения двух частных критериев, который позволил найти наилучший компромисс между ними; на основе ДКО получено решение задачи о двухфакторной брахистохроме с предварительным рассмотрением вспомогательной задачи о брахистохроме заданной длины. Предложено рациональное практическое решение задачи, обладающее более простой геометрией, чем строго оптимальное: принять дугу окружности с центральным углом, который подбирается на основе взятого ДКО.

Ключевые слова: брахистохрона, оптимизация, время движения, длина траектории, двухфакторный критерий, рациональное решение

Для цитирования: Смирнов А. С., Суворов С. В. Двухфакторная оптимизация в задаче о брахистохроме // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 124–139. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15211>

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.15211>

TWO-FACTOR OPTIMIZATION IN THE BRACHISTOCHRONE PROBLEM

A. S. Smirnov^{1,2} ✉, S. V. Suvorov³

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Institute of Problems of Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russia;

³ Central Design Bureau of Transport Engineering, Tver, Russia

✉ smirnov.alexey.1994@gmail.com

Abstract. The paper puts forward a new modification of the well-known brachistochrone problem. The joint account of minimizing the motion time and the trajectory length in their functional relationship has been introduced. A two-factor optimization criterion (TOC) was constructed in the form of a product of two particular criteria, which made it possible to find



the best compromise between them. On the TOC basis a solution to the problem of a two-factor brachistochrone was obtained using a preliminary consideration of the auxiliary problem on a brachistochrone with a given length. A rational practical solution of the problem was proposed. It was characterized by a simpler geometry than the strictly optimal one: to adopt a circular arc with a central angle selected on the basis of the taken TOC.

Keywords: brachistochrone, optimization, motion time, trajectory length, two-factor criterion, rational solution

For citation: Smirnov A. S., Suvorov S. V., Two-factor optimization in the brachistochrone problem, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 124–139. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15211>

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

Введение

Известно, что задача о брахистохроне была сформулирована швейцарским ученым И. Бернулли, который опубликовал ее постановку в 1696 году в журнале «Acta Eruditorum» под заглавием «Новая задача, к разрешению которой приглашаются математики».

Формулировка этой задачи была следующей:

«В вертикальной плоскости даны две точки A и B . Определить путь AMB , спускаясь по которому под влиянием собственной тяжести, тело M , начав двигаться из точки A , дойдет до другой точки B в кратчайшее время».

Поставленную задачу смогли решить такие великие ученые, как Г. Лейбниц, Я. Бернулли, Г. Лопиталь и И. Ньютон [1]. Несмотря на то, что они представили разные решения, конечные ответы у всех них оказались одинаковыми: искомой траекторией является дуга циклоиды. Стоит подчеркнуть, что решение Я. Бернулли стало первым шагом к появлению новой научной дисциплины, которая получила название «вариационное исчисление». Именно с задачи о брахистохроне начинается изложение этой дисциплины и в наше время. Интересно также отметить, что полученное решение на практике было издавна хорошо известно строителям в тропических странах, где в условиях затяжных дождей наискорейший скат воды с крыши существенно влияет на ее долговечность. В частности, крыши буддийских пагод по своей форме отчетливо напоминают дугу циклоиды.

В настоящее время классическая задача о брахистохроне представляет как учебный, так и научный интерес, и она имеет множество различных обобщений, которые полезны для более широкого применения на практике. Первым (и далеко не единственным) ее обобщением можно считать рассмотренную Л. Эйлером задачу о брахистохроне в сопротивляющейся среде. Это направление исследований продолжается целым рядом современных работ [2 – 5], в которых принимается модель как вязкого, так и кулонова трения. Представляют интерес также задача о брахистохроне для катящегося диска [6 – 8] и различные ее пространственные варианты [9, 10], а также некоторые другие обобщения, детальный перечень которых дан в статье [11].

Постановка задачи

Предположим, что начальная и конечная точки A и B лежат на одном горизонтальном уровне и расположены на расстоянии l друг от друга (рис. 1).

Тогда задача о брахистохроне может трактоваться как задача об оптимальном проектировании тоннеля под землей, которая учитывает в классической постановке минимизацию лишь одного фактора – времени движения T материальной точки по кривой $y(x)$. В то же время, длина этой кривой оказывается достаточно большой, что может создавать неудобства для практической реализации такой траектории. Более того, при наличии подземных рек зачастую невозможно проложить тоннель именно по циклоиде, вследствие чего приходится отказываться от данного варианта в пользу каких-либо других. Наконец, минимизация длины пути прямо связана с такими экономическими показа-

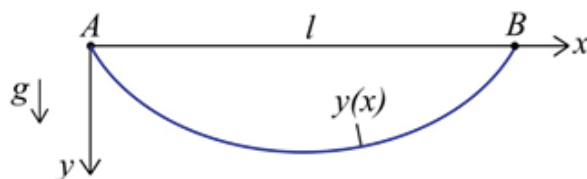


Рис. 1. Постановка классической задачи о брахистохроне: тело M под влиянием собственной тяжести должно пройти траекторию $y(x)$ от точки A до точки B в кратчайшее время (g – ускорение свободного падения)

телями, как расходы на построение и последующее содержание тоннеля, путь которого имитирует искомая траектория.

Из вышеизложенного вытекает, что минимизация длины траектории L приобретает важный практический смысл и является крайне желательной. Однако ясно, что одновременная минимизация двух величин T и L лишена смысла, поскольку они определяются известными выражениями

$$T = \int_0^l \sqrt{\frac{1+y'^2}{2gy}} dx, \quad L = \int_0^l \sqrt{1+y'^2} dx \quad (1)$$

(штрихом обозначена производная по координате x) и, очевидно, принимают свои минимальные значения на различных экстремалях $y(x)$ (циклоиде и прямой соответственно).

Тем не менее, задача о поиске наилучшего компромисса между этими двумя факторами, который можно определить путем конструирования и анализа адекватного двухфакторного критерия оптимизации, оказывается вполне осмысленной. Ясно, что для максимальной эффективности траектории разумно потребовать достижения наилучшего относительного компромисса между величинами T и L , принимая во внимание их функциональную взаимосвязь. Нетрудно понять, что для этого целесообразно синтезировать мультипликативный критерий оптимизации в виде следующей композиции частных критериев T и L :

$$J = T \cdot L = \min. \quad (2)$$

Подобный критерий был успешно применен в других многокритериальных задачах механики [12, 13], где он показал свою эффективность и приобрел важное практическое значение. Критерий (2) позволяет оценить, во сколько раз необходимо увеличить время движения T , для того чтобы добиться при этом уменьшения длины траектории L в наибольшей степени по отношению к увеличению времени. Именно это и подразумевается под наилучшим относительным компромиссом между названными факторами.

Основной целью настоящей работы является анализ двухфакторного критерия оптимизации (2) и поиск оптимальной траектории по данному критерию.

Определение брахистохроны заданной длины

Прежде, чем обращаться непосредственно к критерию (2), рассмотрим подробно вспомогательную задачу о нахождении брахистохроны заданной длины, которая математически формулируется следующим образом [14]:

$$T = \min, \quad L = \text{fix}, \quad (3)$$

где необходимо принять во внимание выражения (1).

Задача (3) представляет собой изопериметрическую задачу вариационного исчисления, для решения которой, как известно, необходимо составить функцию

$$H = \sqrt{\frac{1+y'^2}{2gy}} + \lambda \sqrt{1+y'^2} = H(y, y'), \quad (4)$$



где λ – постоянная величина.

Далее следует рассматривать задачу об экстремалях функционала с подынтегральной функцией $H(y', y)$. Как и в классической задаче о брахистохроне, эта функция не зависит явно от x , поэтому для ее решения воспользуемся первым интегралом уравнения Эйлера – Лагранжа:

$$H - y' \frac{\partial H}{\partial y'} = \left(\frac{1}{\sqrt{2gy}} + \lambda \right) \frac{1}{\sqrt{1+y'^2}} = C, \quad (5)$$

где C – константа.

Сделаем в этом уравнении стандартную подстановку $y' = \operatorname{ctg} \varphi$, в результате чего после некоторых упрощений получим:

$$y = \frac{a \sin^2 \varphi}{2(1 - b \sin \varphi)^2}, \quad a = \frac{1}{gC^2}, \quad b = \frac{\lambda}{C}, \quad (6)$$

где a, b – новые постоянные величины, связанные с C и λ .

Вычисляя теперь y' согласно выражению (6) и учитывая, что $y' = \operatorname{ctg} \varphi$, получим следующее уравнение:

$$y' = \frac{a \sin \varphi \cos \varphi}{(1 - b \sin \varphi)^3} \varphi' = \operatorname{ctg} \varphi. \quad (7)$$

Разделяя в нем переменные, будем иметь:

$$\frac{a \sin^2 \varphi}{(1 - b \sin \varphi)^3} d\varphi = dx, \quad x = a \int \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - b \sin \varphi)^3} d\varphi. \quad (8)$$

Для вычисления получившегося интеграла будем использовать следующую тригонометрическую подстановку:

$$z = \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2}, \quad \varphi = 2 \operatorname{arctg} z, \quad d\varphi = \frac{2dz}{1+z^2}, \quad \sin \varphi = \frac{2z}{1+z^2}. \quad (9)$$

В результате после преобразований приходим к вычислению интеграла от дробно-рациональной функции:

$$\int \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - b \sin \varphi)^3} d\varphi = 8 \int \frac{z^2}{(z^2 - 2bz + 1)^3} dz. \quad (10)$$

С этой целью воспользуемся таблицами интегралов [15]. Из них видно, что при $|b| < 1$ и $|b| > 1$ этот интеграл будет иметь различные представления. Это связано с тем, что в первом случае корни квадратного трехчлена $z^2 - 2bz + 1$ являются комплексно-сопряженными, а во втором случае – вещественными.

Случай представления интеграла (10). Рассмотрим первый случай, когда $|b| < 1$. Интеграл от дробно-рациональной функции (10) в этом случае есть

$$\int \frac{z^2}{(z^2 - 2bz + 1)^3} dz = \frac{1}{4(1-b^2)} \left[\frac{(2b^2 - 1)z - b}{(z^2 - 2bz + 1)^2} + \frac{2b^2 + 1}{2(1-b^2)} \left(\frac{z - b}{z^2 - 2bz + 1} + \frac{1}{\sqrt{1-b^2}} \operatorname{arctg} \frac{z - b}{\sqrt{1-b^2}} \right) \right]. \quad (11)$$

Возвращаясь к исходной переменной φ , получаем, согласно равенству (10), для $x(\varphi)$:

$$x = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left[\frac{2b^2+1}{\sqrt{1-b^2}} \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b}{\sqrt{1-b^2}} + \frac{\cos \varphi ((4b^2-1) \sin \varphi - 3b)}{2(1-b \sin \varphi)^2} \right] + x_0, \quad (12)$$

где x_0 – константа интегрирования.

Поскольку по условию задачи точки A и B лежат на одной горизонтали на расстоянии l , то $y(0) = 0$, $y(l) = 0$. Из выражения (6) ясно, что этим точкам отвечают значения параметра $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$. Константа x_0 определяется из условия $x = 0$ при $\varphi = 0$:

$$x_0 = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left(\frac{2b^2+1}{\sqrt{1-b^2}} \operatorname{arctg} \frac{b}{\sqrt{1-b^2}} + \frac{3b}{2} \right). \quad (13)$$

В свою очередь, константа a находится из условия $x = l$ при $\varphi = \pi$:

$$a = \frac{l(1-b^2)^2}{\frac{2b^2+1}{\sqrt{1-b^2}} \left(\frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \frac{b}{\sqrt{1-b^2}} \right) + 3b}. \quad (14)$$

В результате решение задачи (3) для случая $|b| < 1$ имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} x = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left[\frac{2b^2+1}{\sqrt{1-b^2}} \left(\operatorname{arctg} \frac{\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b}{\sqrt{1-b^2}} + \operatorname{arctg} \frac{b}{\sqrt{1-b^2}} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\cos \varphi ((4b^2-1) \sin \varphi - 3b)}{2(1-b \sin \varphi)^2} + \frac{3b}{2} \right], \\ y = \frac{a \sin^2 \varphi}{2(1-b \sin \varphi)^2}, \end{array} \right. \quad (15)$$

где величина a определяется формулой (14).

Таким образом, посредством параметрического решения (15) можно построить семейство брахистохрон, отвечающих различным значениям параметра b при условии $|b| < 1$. На рис. 2 приведены эти траектории, причем для удобства по осям откладываются безразмерные координаты x/l и y/l .

Отметим, что значению $b = 0$ соответствует циклоидальная траектория. В самом деле, из выражений (15) непосредственно вытекает уравнение циклоиды:

$$\left\{ \begin{array}{l} x = \frac{a}{4} (2\varphi - \sin 2\varphi) = r(\psi - \sin \psi), \\ y = \frac{a}{4} (1 - \cos 2\varphi) = r(1 - \cos \psi), \end{array} \right. \quad (16)$$

где $r = a/4$ – радиус производящего круга; $\psi = 2\varphi$ – его угол поворота, изменяющийся от 0 до 2π .

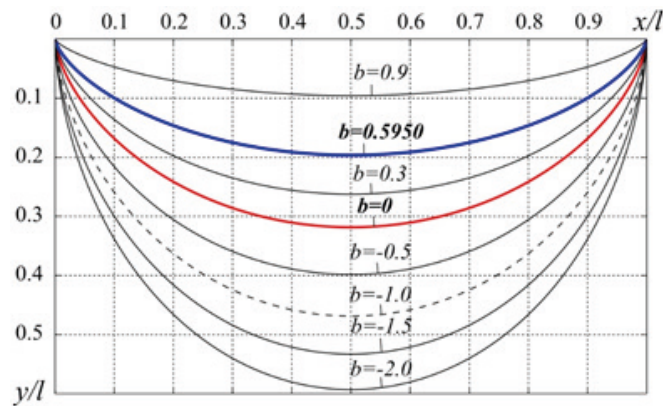


Рис. 2. Семейство брахистохрон различной длины (построены в безразмерных координатах). См. формулы (15), случай $0 < |b| < 1$; (16), случай $b = 0$ (кривая выделена красным цветом); (26), случай $b < -1$, и (32), случай $b = -1$ (кривая выделена пунктиром). Траектория, оптимальная по двухфакторному критерию (2), выделена синим цветом

Значениям $0 < b < 1$ отвечают траектории, лежащие выше циклоиды, а значениям $-1 < b < 0$ – ниже нее. Ясно, что безразмерный параметр b однозначно связан с длиной L кривой, которая определяется второй формулой (1).

Для установления этой связи подставим в указанную формулу выражение $y' = \text{ctg } \varphi$, вследствие чего получим:

$$L = a \int_0^{\pi} \frac{\sin \varphi}{(1 - b \sin \varphi)^3} d\varphi = 4a \int_0^{\infty} \frac{z(1 + z^2)}{(z^2 - 2bz + 1)^3} dz, \quad (17)$$

где сделана та же самая замена переменной (9), что и выше.

Пользуясь вновь таблицами интегралов [15], находим:

$$L = \frac{a}{(1 - b^2)^2} \left[\frac{3b}{\sqrt{1 - b^2}} \left(\frac{\pi}{2} + \text{arctg} \frac{b}{\sqrt{1 - b^2}} \right) + 2 + b^2 \right]. \quad (18)$$

Подставляя сюда значение a , согласно формуле (14), и вводя в рассмотрение безразмерную величину $\delta = l / L$, которая из физического смысла задачи лежит в пределах $0 < \delta < 1$, получим:

$$\delta = \frac{\left(\frac{\pi}{2} + \text{arctg} \frac{b}{\sqrt{1 - b^2}} \right) \frac{2b^2 + 1}{\sqrt{1 - b^2}} + 3b}{\left(\frac{\pi}{2} + \text{arctg} \frac{b}{\sqrt{1 - b^2}} \right) \frac{3b}{\sqrt{1 - b^2}} + 2 + b^2}. \quad (19)$$

Посредством этой формулы можно построить график зависимости $\delta(b)$ на интервале $-1 < b < 1$ (рис. 3). Отметим, что значению $b = 1$ отвечает прямая, когда $\delta = 1$, а значению $b = 0$ – циклоида, когда $\delta = \pi / 4 \approx 0,7854$.

Наконец, выразим время движения по оптимальной траектории по первой формуле (1), выполняя в ней подстановку $y' = \text{ctg } \varphi$ и пользуясь выражениями (6) и (8):

$$T = \sqrt{\frac{a}{g}} \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{(1 - b \sin \varphi)^2} = 2 \sqrt{\frac{a}{g}} \int_0^{\infty} \frac{1 + z^2}{(z^2 - 2bz + 1)^2} dz. \quad (20)$$

Пользуясь таблицами интегралов [15], находим:

$$T = 2\sqrt{\frac{a}{g}} \frac{1}{1-b^2} \left[\frac{1}{\sqrt{1-b^2}} \left(\frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \frac{b}{\sqrt{1-b^2}} \right) + b \right], \quad (21)$$

где следует помнить, что величина a определяется по формуле (14).

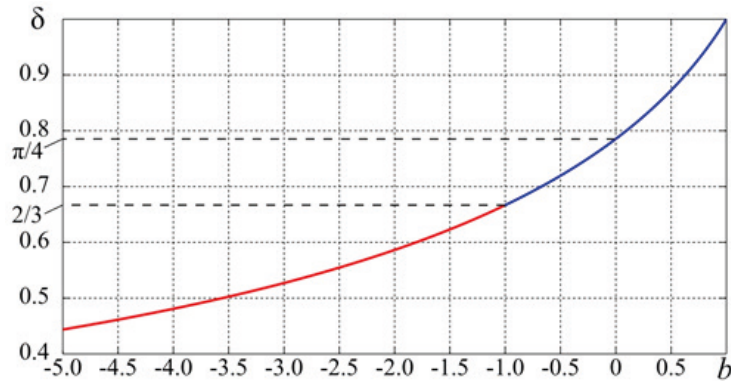


Рис. 3. График зависимостей величины δ от параметра b на интервале $-1 < b < 1$ (кривая выделена синим цветом) и при $b \leq -1$ (кривая выделена красным цветом)

Рассмотрим теперь второй случай, когда $|b| > 1$. Устанавливаем при помощи таблиц интегралов [15], что интеграл (10) будет иметь вид:

$$\int \frac{z^2}{(z^2 - 2bz + 1)^3} dz = \frac{1}{4(1-b^2)} \left[\frac{(2b^2 - 1)z - b}{(z^2 - 2bz + 1)^2} + \frac{2b^2 + 1}{2(1-b^2)} \left(\frac{z - b}{z^2 - 2bz + 1} + \frac{1}{2\sqrt{b^2 - 1}} \ln \left| \frac{z - b - \sqrt{b^2 - 1}}{z - b + \sqrt{b^2 - 1}} \right| \right) \right]. \quad (22)$$

Возвращаясь к исходной переменной φ , получаем, согласно выражению (10), функцию $x(\varphi)$:

$$x = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left[\frac{2b^2 + 1}{2\sqrt{b^2 - 1}} \ln \left| \frac{\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b - \sqrt{b^2 - 1}}{\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b + \sqrt{b^2 - 1}} \right| + \frac{\cos \varphi ((4b^2 - 1) \sin \varphi - 3b)}{2(1 - b \sin \varphi)^2} \right] + x_0. \quad (23)$$

Как и прежде, определим константу x_0 из условия $x = 0$ при $\varphi = 0$:

$$x_0 = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left(\frac{3b}{2} - \frac{2b^2 + 1}{2\sqrt{b^2 - 1}} \ln \left| \frac{b + \sqrt{b^2 - 1}}{b - \sqrt{b^2 - 1}} \right| \right). \quad (24)$$

Затем найдем константу a из условия $x = l$ при $\varphi = \pi$:

$$a = \frac{l(1-b^2)^2}{\frac{2b^2 + 1}{2\sqrt{b^2 - 1}} \ln \left| \frac{b - \sqrt{b^2 - 1}}{b + \sqrt{b^2 - 1}} \right| + 3b}. \quad (25)$$

В результате решение задачи для случая $|b| > 1$ примет окончательный вид:

$$\left\{ \begin{aligned} x &= \frac{a}{(1-b^2)^2} \left[\frac{2b^2+1}{2\sqrt{b^2-1}} \ln \left| \frac{\left(\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b - \sqrt{b^2-1}\right)(b - \sqrt{b^2+1})}{\left(\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} - b + \sqrt{b^2-1}\right)(b + \sqrt{b^2+1})} \right| \right. \\ &\quad \left. + \frac{\cos \varphi \left((4b^2 - 1) \sin \varphi - 3b \right)}{2(1 - b \sin \varphi)^2} + \frac{3b}{2} \right], \\ y &= \frac{a \sin^2 \varphi}{2(1 - b \sin \varphi)^2}, \end{aligned} \right. \quad (26)$$

где a определяется по формуле (25).

Посредством параметрического решения (26) можно построить оптимальные траектории, отвечающие значениям параметра b из интервала $b < -1$, которые (см. рис. 2), продолжают семейство траекторий, построенных ранее для значений $-1 < b < 1$. Что же касается значений $b > 1$, то они физически невозможны, т. е. им не отвечают оптимальные траектории. Это можно увидеть более четко, если выразить длину кривой L по второй формуле (1):

$$L = \frac{a}{(1-b^2)^2} \left(-\frac{3b}{2\sqrt{b^2-1}} \ln \left| \frac{b + \sqrt{b^2-1}}{b - \sqrt{b^2-1}} \right| + 2 + b^2 \right). \quad (27)$$

Подставляя сюда выражение (25), выразим значение безразмерной величины $\delta = l/L$:

$$\delta = \frac{\frac{2b^2+1}{2\sqrt{b^2-1}} \ln \left| \frac{b - \sqrt{b^2-1}}{b + \sqrt{b^2-1}} \right| + 3b}{-\frac{3b}{2\sqrt{b^2-1}} \ln \left| \frac{b + \sqrt{b^2-1}}{b - \sqrt{b^2-1}} \right| + 2 + b^2}, \quad (28)$$

которому при $b > 1$ отвечают отрицательные значения величины δ , что не может соответствовать действительности, если исходить из ее представления как отношение длин. Зависимость (28) для значений $b < -1$ также приведена на рис. 3.

Остается выразить время движения по оптимальной траектории по первой формуле (1) для рассматриваемого случая:

$$T = 2\sqrt{\frac{a}{g}} \frac{1}{1-b^2} \left[-\frac{1}{2\sqrt{1-b^2}} \ln \left| \frac{b + \sqrt{b^2-1}}{b - \sqrt{b^2-1}} \right| + b \right], \quad (29)$$

где следует помнить, что величина a определяется по формуле (25).

Отметим, что при $b \rightarrow 1$, согласно формуле (28), получаем, что $\delta \rightarrow 1$ (т. е. $L \rightarrow l$), а по формуле (29) будем иметь $T \rightarrow \infty$, так что случай $b = 1$ является предельным.

Рассмотрим для полноты картины отдельно случай, когда $b = -1$. Это промежуточный вариант между исследованными выше вариантами $-1 < b < 1$ и $b < -1$. Имеем для него следующее:

$$\int \frac{z^2}{(z^2 - 2bz + 1)^3} dz = \int \frac{z^2}{(z+1)^6} dz = -\frac{10z^2 + 5z + 1}{30(z+1)^5}. \quad (30)$$

Возвращаемся к исходной переменной φ и, согласно (10), получаем:

$$x = -\frac{4a \left(10 \operatorname{tg}^2 \frac{\varphi}{2} + 5 \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} + 1 \right)}{15 \left(\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} + 1 \right)^5} + x_0. \quad (31)$$

Учитывая, что $x = 0$ при $\varphi = 0$, а $x = l$ при $\varphi = \pi$, находим, согласно выражению (31), что $x_0 = 4a / 15$, а $a = 15l / 4$, так что в этом случае имеем $x_0 = l$.

Таким образом, решение для случая $b = -1$ может быть записано в виде

$$\begin{cases} x = \frac{4a}{15} \left[1 - \frac{10 \operatorname{tg}^2 \frac{\varphi}{2} + 5 \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} + 1}{\left(\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} + 1 \right)^5} \right], \\ y = \frac{a \sin^2 \varphi}{2(1 - b \sin \varphi)^2}. \end{cases} \quad (32)$$

Эта траектория приведена на рис. 2 пунктирной линией. Наконец, выразим отвечающие ей величины L и T :

$$L = 4a \int_0^\infty \frac{z(1+z^2)}{(z+1)^6} dz = \frac{2a}{5}, \quad T = 2 \sqrt{\frac{a}{g}} \int_0^\infty \frac{1+z^2}{(z+1)^4} dz = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{a}{g}}. \quad (33)$$

Отсюда вытекает, что при $b = -1$ будем иметь значение $\delta = l / L = 2 / 3 \approx 0,6667$, что полностью согласуется с графиком, приведенным на рис. 3.

Таким образом, задачу об определении брахистохроны заданной длины можно считать решенной.

Определение оптимального решения по двухфакторному критерию

Перейдем теперь непосредственно к поиску оптимального решения по мультипликативному критерию (2). Ясно, что для этого вполне достаточно использовать решение рассмотренной выше задачи о брахистохроне заданной длины, где при заданной величине L была найдена кривая с минимально возможным временем движения T по ней. Это связано с тем, что все другие кривые, которые при заданном L дают по времени больший результат, чем в оптимальном варианте, будут явно хуже и по критерию (2), в связи с чем их можно не принимать во внимание при проведении процедуры двухфакторной оптимизации.

Тем самым можно заключить, что ранее мы выполнили первую стадию оптимизации, а теперь будем рассматривать критерий (2) лишь на тех кривых, которые обладают минимальным временем движения по ним при заданной длине. Поэтому здесь мы имеем уже не вариационную, а обычную алгебраическую задачу о поиске точки минимума функции от одной переменной.

Рассматривая предельные варианты, легко понять, что критерий (2) действительно позволит определить конкретную оптимальную траекторию. В самом деле, в первом предельном случае, когда профиль траектории близок к прямолинейному ($b \rightarrow 1$), будем иметь: $T \rightarrow \infty$, $L \rightarrow l$, т. е. $J \rightarrow \infty$. Напротив, если траектория имеет очень глубокий



профиль ($b \rightarrow -\infty$), то $T \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, так что вновь будет $J \rightarrow \infty$. Это означает, что критерий J , который удобно рассматривать как функцию параметра b , на интервале $b < 1$ должен иметь внутренний экстремум – минимум. Напомним, что время T задается формулами (21) и (29) для случаев $-1 < b < 1$ и $b < -1$ соответственно, длина L определяется при этом выражениями (18) и (27), а входящий в эти выражения параметр a находится из соотношений (14) и (25).

Введем в рассмотрение безразмерную величину I , пропорциональную критерию J и связанную с ним по следующей формуле:

$$I = \frac{J}{l} \sqrt{\frac{g}{l}}. \tag{34}$$

Для определения точки минимума функции (34), в силу достаточно громоздких представлений для T и L , проще всего построить график ее зависимости от параметра b (рис. 4).

По графику на рис. 4 можно определить, что искомым минимумом отвечает значению $b_* = 0,5950$. Отметим, что его расположение на интервале $0 < b < 1$ можно выявить и из общих соображений. В самом деле, значение $b = 0$ отвечает циклоидальному профилю, а достигнуть относительного компромисса по критерию (2) можно лишь путем ухода от циклоиды вверх, увеличивая время движения T и понижая при этом длину траектории L . Теперь можно понять, чему равны значения T и L при движении по траектории, оптимальной по двухфакторному критерию, а также значение самого критерия J . Если подставить найденное значение b_* в формулы (21) и (18) с учетом (14), а также принять во внимание, что $I_* = 2,9430$ (см. рис. 4), и использовать формулу (34), то получим:

$$T_* = 2,6265 \sqrt{\frac{l}{g}}, \quad L_* = 1,1205l, \quad J_* = I_* l \sqrt{\frac{l}{g}} = 2,9430l \sqrt{\frac{l}{g}}. \tag{35}$$

В то же время, для циклоидальной траектории при $b = 0$ имеем:

$$T_c = \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{l}{g}} \approx 2,5066 \sqrt{\frac{l}{g}}, \quad L_c = \frac{4l}{\pi} \approx 1,2732l. \tag{36}$$

Сопоставляя соответствующие значения (35) и (36), можно видеть, что для траектории, оптимальной по критерию (2), время движения на 4,8 % больше, чем для циклоиды, а длина этой траектории оказывается меньше длины циклоиды на 12 %.

Полученные результаты наглядно демонстрируют искомым наилучший относительный

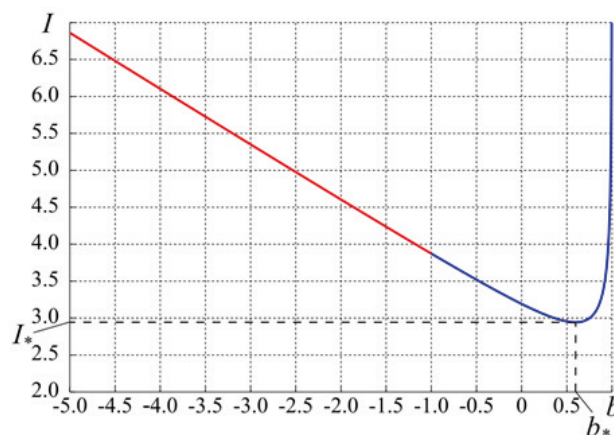


Рис. 4. График зависимостей двухфакторного критерия I от параметра b на интервале $-1 < b < 1$ (кривая выделена синим цветом) и при $b \leq -1$ (кривая выделена красным цветом).

Показан минимум кривой $I_* = 2,9430$ при $b_* = 0,5950$

компромисс между двумя критериями T и L и доказывают, что посредством достаточно небольшого увеличения времени движения можно добиться гораздо более значительного снижения длины траектории. Полученные значения позволяют лишний раз рекомендовать критерии вида (2) для решения многокритериальных задач в различных областях механики. Отметим, что найденная оптимальная траектория также приведена на рис. 2 ($b = 0,5950$).

Построение рационального решения

Как известно, решения большинства оптимизационных задач механики являются оптимальными лишь в формальном (т. е. чисто математическом) смысле, что связано с их достаточно сложной геометрией. Естественно, это приводит к определенным трудностям при их практической реализации. В этой связи возникает вопрос о построении решения, которое будет не строго оптимальным, но обладающим более простой геометрией и более удобным для конкретных практических целей. Такое решение можно назвать квазиоптимальным, или рациональным, и оно будет оптимальным не в целом, а лишь на классе некоторых функций, характеризующих упрощенную геометрию задачи [16].

В рассматриваемой задаче о брахистохроне целесообразно в качестве такого профиля принять круговой, т. е. рассматривать траектории в виде дуги окружности. Интересно отметить, что Г. Галилей, доказывая, что кратчайший путь не всегда оказывается самым быстрым, сравнивал время движения по прямой именно с временем движения по дуге окружности [11]. Таким образом, задача о нахождении рационального решения ставится следующим образом:

Необходимо из всех окружностей, проходящих через две заданные точки A и B , лежащие на одной горизонтали (в нашем изложении), выбрать такую, движение по которой будет доставлять заданному критерию оптимизации экстремальное значение.

Сформулированная постановка задачи показана графически на рис. 5.

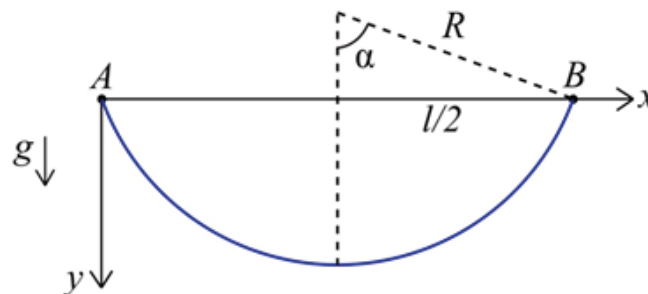


Рис. 5. Постановка задачи для рационального решения на основе кругового профиля радиусом R (2α – центральный угол)

Рассмотрим при этом как минимизацию только времени движения, так и двухфакторный критерий (2). Если при сопоставлении параметров этих круговых траекторий с характеристиками рассмотренных выше решений их различие будет достаточно малым, то это позволит рекомендовать данные рациональные решения для использования на практике взамен исходных, строго оптимальных решений.

Хорошо известно, что половина периода колебаний математического маятника, равная времени движения по окружности от точки A до точки B , определяется формулой [17]:

$$T = 2\sqrt{\frac{R}{g}}K\left(\sin\frac{\alpha}{2}\right), \quad (37)$$

где R – радиус окружности, α – амплитуда колебаний, $K(\kappa)$ – полный эллиптический интеграл I рода с модулем κ .

Нетрудно понять, что имеет место следующая связь между величинами R , α и l (см. рис. 5):



$$R = \frac{l}{2 \sin \alpha}. \quad (38)$$

Подставляя выражение (38) в формулу (37), получим окончательное выражение для времени движения по дуге окружности с центральным углом 2α :

$$T = \sqrt{\frac{2l}{g}} \frac{1}{\sqrt{\sin \alpha}} K\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right) = T(\alpha). \quad (39)$$

Сначала рассмотрим задачу о минимизации времени движения. С этой целью продифференцируем функцию (39) по переменной α , учитывая правила вычисления производных эллиптических интегралов, и приравняем нулю полученное выражение. В результате после преобразований можно прийти к следующему уравнению:

$$(1 + 2 \cos \alpha) K\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right) = 2E\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right), \quad (40)$$

где $E(k)$ – полный эллиптический интеграл II рода с модулем k .

Единственный корень уравнения (40), отвечающий смыслу задачи, есть $\alpha_{*1} = 1,2433$, а отвечающее ему время движения, согласно выражению (39), и длина траектории, определяемая формулой $L = 2\alpha R = \alpha l / \sin \alpha$ и необходимая для дальнейших сопоставлений, будут равны соответственно:

$$T_{*1} = 2,5233 \sqrt{\frac{l}{g}}, \quad L_{*1} = 1,3131l. \quad (41)$$

Видно, что время T_{*1} превышает время движения по циклоиде, определяемое первой формулой (36), всего на 0,7 %. Это означает, что найденная дуга окружности с центральным углом $2\alpha_{*1} = 2,4866$ (или $142,47^\circ$) почти не уступает циклоиде в отношении временного фактора, вследствие чего ее можно рекомендовать для практических приложений.

Обращаясь теперь к определению наилучшего параметра круговой траектории по двухфакторному критерию (2), составим для него выражение с учетом формулы (39) и примем во внимание, что $L = \alpha l / \sin \alpha$:

$$J = l \sqrt{\frac{2l}{g}} \frac{\alpha}{\sin^{3/2} \alpha} K\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right) = J(\alpha). \quad (42)$$

Дифференцируя эту функцию по α и приравнявая нулю получившееся при этом выражение, получим после упрощений следующее уравнение:

$$[\alpha(1 + 4 \cos \alpha) - 2 \sin \alpha] K\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right) = 2\alpha E\left(\sin \frac{\alpha}{2}\right), \quad (43)$$

единственный корень которого, отвечающий смыслу задачи, есть $\alpha_{*2} = 0,8720$. Соответствующие ему время движения, длина траектории и значение двухфакторного критерия тогда будут иметь следующий вид:

$$T_{*2} = 2,6650 \sqrt{\frac{l}{g}}, \quad L_{*2} = 1,1390l, \quad J_{*2} = 3,0354l \sqrt{\frac{l}{g}}. \quad (44)$$

Нетрудно видеть, что по сравнению с формулами (41) время движения увеличилось на 5,6 %, тогда как длина траектории уменьшилась на 13,3 %. Эти значения также иллюстрируют достигнутый наилучший компромисс между указанными факторами для случая, когда оптимизация осуществляется на классе дуг окружности. Остается сопоставить найденные выражения (44) с аналогичными величинами для полученного ранее, строго оптимального решения по двухфакторному критерию, которые даются формулами (35).

Так, время T_{*2} больше значения T_* всего на 1,5 %, длина L_{*2} оказывается больше L_*

всего на 1,7 %, и, наконец, значение двухфакторного критерия J_{*2} превышает J_* лишь на 3,1 %, что можно считать очень хорошими результатами. Поэтому, если необходимо использовать двухфакторный критерий оптимизации, то найденную выше оптимальную по этому критерию траекторию можно с приемлемой точностью заменить дугой окружности с центральным углом $2\alpha_{*2} = 1,7440$ (или $99,92^\circ$), которая имеет намного более простую геометрию. Найденные круговые профили, оптимальные по рассмотренным выше критериям $T = \min$ и $J = \min$, представлены на рис. 6 пунктирными линиями вместе с соответствующими траекториями, которые являются оптимальными по тем же критериям в целом и изображены сплошными линиями.

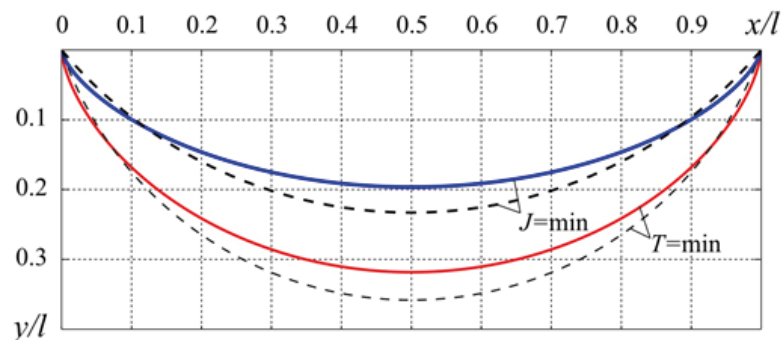


Рис. 6. Сравнение оптимальных профилей (сплошные линии) с рациональными (пунктиры); T, J – критерии оптимизации (время движения материальной точки по кривой и мультипликативный, соответственно)

Заключение

В настоящей работе была рассмотрена модификация классической задачи о брахистохроне, которая помимо минимизации времени движения предусматривает также минимизацию длины траектории. Для ее решения был синтезирован двухфакторный мультипликативный критерий оптимизации. В процессе исследования поставленной проблемы была детально изучена задача о брахистохроне заданной длины, результаты решения которой позволили определить простейшим образом оптимальную траекторию по принятому двухфакторному критерию. Представленные в статье численные значения и проведенные сопоставления позволяют сделать вывод, что подобные мультипликативные критерии являются адекватными и их целесообразно использовать и при решении прочих задач оптимизации механических систем, где требуется определять наилучший относительный компромисс между несколькими факторами.

Кроме того, был рассмотрен вопрос о построении рационального решения, для которого характерны упрощенная геометрия и удобство при практическом использовании. Показано, что круговой профиль при надлежащем подборе его параметров на основе принятого критерия оптимизации практически не уступает строго оптимальному решению. Поэтому можно рекомендовать построение аналогичных рациональных решений и для многих других задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Яковлев В. И. Начала аналитической механики. М., Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. 352 с.
2. Голубев Ю. Ф. Брахистохрона с трением // Известия Российской академии наук. Теория и системы управления. 2010. № 5. С. 41–52.
3. Зароднюк А. В., Черкасов О. Ю. К задаче о брахистохроне с линейным вязким трением // Вестник Московского университета. Сер. 1: Математика. Механика. 2015. № 3. С. 65–69.
4. Sumbatov A. S. Brachistochrone with Coulomb friction as the solution of an isoperimetrical variational problem // International Journal of Non-Linear Mechanics. 2017. Vol. 88. January. Pp. 135–141.



5. **Wensrich C. M.** Evolutionary solutions to the brachistochrone problem with Coulomb friction // *Mechanics Research Communications*. 2004. Vol. 31. No. 2. Pp. 151–159.
6. **Лереза В. П.** Брахистохрона для катящегося цилиндра // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. 2010. № 1. С. 34–41.
7. **Акуленко Л. Д.** Аналог классической брахистохроны для диска // *Доклады Академии наук*. 2008. Т. 419. № 2. С. 193–196.
8. **Sumbatov A. S.** Problem of the brachistochronic motion of a heavy disk with dry friction // *International Journal of Non-Linear Mechanics*. 2018. Vol. 99. March. Pp. 295–301.
9. **Legeza V. P.** Brachistochronic motion of a material point on a transcendental surface // *International Applied Mechanics*. 2020. Vol. 56. No. 3. Pp. 358–366.
10. **Гладков С. О., Богданова С. Б.** К теории пространственной брахистохроны // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2020. № 68. С. 53–60.
11. **Сумбатов А. С.** Задача о брахистохроне (классификация обобщений и некоторые новые результаты) // *Труды МФТИ*. 2017. Т. 9. № 3. С. 66–75.
12. **Смольников Б. А., Смирнов А. С.** Новый критерий оптимизации в задаче Гомана // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. 19–24 августа 2019 г., г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия. Сборник трудов в 4-х тт. Т. 1. Общая и прикладная механика. Уфа: РИЦ БашГУ, 2019. С. 266–268.
13. **Смирнов А. С., Смольников Б. А.** Оптимизация цепной линии // *Труды семинара «Компьютерные методы в механике сплошной среды» 2019–2020*. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского университета, 2020. С. 35–50.
14. **Гладков С. О., Богданова С. Б.** Аналитическое и численное решение задачи о брахистохроне в некоторых общих случаях // *Итоги науки и техники. Серия «Современная математика и ее приложения». Тематические обзоры*. 2018. Т. 145. С. 114–122.
15. **Градштейн И. С., Рыжик И. М.** Таблицы интегралов, рядов и произведений. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 1232 с.
16. **Суворов С. В., Смирнов А. С.** Оценка эффективности оптимальных балочных конструкций // *Неделя науки СПбПУ: материалы научной конференции с международным участием. Институт прикладной математики и механики*. 18 – 23 ноября 2019 г., Санкт-Петербургский политехнический университет. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2019. С. 102–104.
17. **Сикорский Ю. С.** Элементы теории эллиптических функций с приложениями к механике. М.: КомКнига, 2006. 366 с.

REFERENCES

1. **Yakovlev V. I.** The beginnings of analytical mechanics, Institute of Computer Sciences, Moscow, Izhevsk, 2002 (in Russian).
2. **Golubev Yu. F.**, Brachistochrone with friction, *Journal of Computer and Systems Sciences*. 49 (5) (2010) 719–730.
3. **Zarodnyuk A. V., Cherkasov O. Yu.**, Brachistochrone with linear viscous friction, *Moscow University Mechanics Bulletin*. 70 (3) (2015) 70–74.
4. **Sumbatov A. S.**, Brachistochrone with Coulomb friction as the solution of an isoperimetrical variational problem, *Intern. J. Non-Linear Mech.* 88 (January) (2017) 135–141.
5. **Wensrich C. M.**, Evolutionary solutions to the brachistochrone problem with Coulomb friction, *Mech. Res. Commun.* 31 (2) (2004) 151–159.
6. **Legeza V. P.**, Brachistochrone for a rolling cylinder. *Mechanics of Solids*. 45 (1) (2010) 27–33.
7. **Akulenko L. D.**, An analog of the classical brachistochrone for a disk, *Doklady Physics*. 53 (3) (2008) 156–159.
8. **Sumbatov A. S.**, Problem of the brachistochronic motion of a heavy disk with dry friction, *Intern. J. Non-Linear Mech.* 99 (March) (2018) 295–301.
9. **Legeza V. P.**, Brachistochronic motion of a material point on a transcendental surface, *Intern. Appl. Mech.* 56 (3) (2020) 358–366.
10. **Gladkov S. O., Bogdanova S. B.**, The theory of a space brachistochrone, *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 68 (2020) 53–60 (in Russian).

11. **Sumbatov A. S.**, The problem on a brachistochrone (classification of generalizations and some recent results), Trudy MFTI [Transactions of Moscow Institute of Physics and Technology]. 9 (3) (2017) 66–75 (in Russian).

12. **Smolnikov B. A., Smirnov A. S.**, Novyy kriteriy optimizatsii v zadache Gomana [A new optimization criterion in the Hohmann problem], In book: XII Vserossiyskiy Syezd po fundamentalnym problemam teoreticheskoy i prikladnoy mekhaniki. Sbornik trudov. V 4-kh tomakh. T. 1. Obshchaya i prikladnaya mekhanika [Transactions of “The 12-th All-Russian Congress on Fundamental Problems of Theoretical and Applied Mechanics”, Aug. 19–24, 2019, Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia. The collection of works in 4 Vols., Vol. 1: General and Applied Mechanics, Bash. State Univ. Reg. Inf. Center, Ufa (2019) 266–268 (in Russian).

13. **Smirnov A. S., Smolnikov B. A.**, Catenary optimization, In book: Trudy seminar «Kompyuternyye metody v mekhanike sploshnoy sredy» [Transactions of the seminar “Computer Methods in Continuum Mechanics”], 2019–2020, Saint-Petersburg University Publishing, St. Petersburg (2020) 35–50 (in Russian).

14. **Gladkov S. O., Bogdanova S. B.**, Analytical and numerical solution of the problem on brachistochrones in some general cases, J. Math. Sci. 245 (4) (2020) 528–537.

15. **Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M.**, Table of integrals, series and products, Translated from Russian, Seventh Edition, Eds. Jeffrey A., Zwillinger D., Elsevier Inc., Amsterdam, Boston, Heidelberg, etc., 2007.

16. **Suvorov S. V., Smirnov A. S.**, Otsenka effektivnosti optimalnykh balochnykh konstruksiy [Performance evaluation of the optimal beam structures], Nedelya nauki SPbPU: materialy nauchnoy konferentsii s mezhdunarodnym uchastiyem. Institut prikladnoy matematiki i mekhaniki [Proceedings of the scientific conference “Science Week at SPbPU” with international participation. The Institute of Applied Mathematics and Mechanics], November 18–23, 2019, St. Petersburg Polytechnic University Publishing, St. Petersburg (2019) 102–104 (in Russian).

17. **Sikorskiy Yu. S.**, Elementy teorii ellipticheskikh funktsiy s prilozheniyami k mekhanike [Elements of the theory of elliptic functions with applications to mechanics]. KomKniga, Moscow, 2006 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Алексей Сергеевич – ассистент Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия; стажер-исследователь Института проблем машиноведения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnov.alexey.1994@gmail.com
ORCID: 0000-0002-6148-0322

СУВОРОВ Сергей Викторович – инженер по испытаниям 3-й категории Центрального конструкторского бюро транспортного машиностроения, г. Тверь, Россия.

170003, Россия, г. Тверь, Петербургское шоссе, 45в
suvorovsv96@gmail.com
ORCID: 0000-0002-7461-2742

THE AUTHORS

SMIRNOV Alexey S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
Institute of Problems of Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
smirnov.alexey.1994@gmail.com
ORCID: 0000-0002-6148-0322



SUVOROV Sergei V.

Central Design Bureau of Transport Engineering
45v, Peterburgskoe HWY, Tver, 170003, Russia
suvorovsv96@gmail.com
ORCID: 0000-0002-7461-2742


*Статья поступила в редакцию 25.01.2022. Одобрена после рецензирования 23.03.2022.
Принята 23.03.2022.*

Received 25.01.2022. Approved after reviewing 23.03.2022. Accepted 23.03.2022.

Научная статья
УДК 517.947:534.414
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15212>

ДЕЙСТВИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИ ДВИЖУЩЕЙСЯ ТОЧЕЧНОЙ НАГРУЗКИ НА КРУГЛУЮ ПЛАСТИНУ И НАХОДЯЩИЙСЯ ПОД НЕЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКИЙ ВОДОЗАПОЛНЕННЫЙ ОБЪЕМ

Ю. А. Лавров 

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
 lyamm06@rambler.ru

Аннотация. В работе рассмотрена задача определения стационарного поля вынужденных совместных гравитационных движений несжимаемой жидкости в цилиндрическом водоеме и круглой упругой пластины, покрывающей его поверхность. Указанные движения вызываются точечной нагрузкой, совершающей периодические перемещения по внешней поверхности пластины, и представляют собой вынужденные гармонические колебания. Предложена процедура построения аналитического представления для вибрационного поля изгибных смещений пластины. Сформулированы условия возникновения нежелательных механических резонансов. Полученные результаты позволяют находить величины изгибающих моментов и сдвиговых сил при необходимости оценки прочности пластины, а полезны, например, при организации безопасного регулярного движения автомобильного транспорта по слою льда, покрывающего водоем.

Ключевые слова: цилиндрический водоем, гравитационное движение жидкости, упругая пластина, движущаяся нагрузка, гармонические колебания


Для цитирования: Лавров Ю. А. Действие периодически движущейся точечной нагрузки на круглую пластину и находящийся под ней цилиндрический водозаполненный объем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С 140–147. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15212>

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.15212>

THE RESPONSE OF A ROUND PLATE AND A CYLINDRICAL WATER-FILLED VOLUME UNDERNEATH TO A POINT LOAD MOVING PERIODICALLY

Yu. A. Lavrov 

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
 lyamm06@rambler.ru

Abstract. The two-dimensional problem of determining the steady-state field of enforced joint gravitational motions of incompressible fluid and a round elastic plate covering its surface has been considered. The motions are caused by a point load moving periodically along the



outer surface of the plate, and refer to enforced harmonic oscillations in the system. A procedure for constructing an exact analytical representation of the vibrational field of the plate's bending displacements was proposed. The unwanted mechanical resonance conditions were formulated. The results obtained make it possible to find bending moments and shear forces, if need be, in assessment of the strength of a plate. Moreover, they may be useful, for instance, in organizing safe regular movement of vehicles on a layer of ice covering a body of water.

Keywords: cylindrical reservoir, gravitational fluid motion, elastic plate, moving load, harmonic oscillations

For citation: Lavrov Yu. A., The response of a round plate and a cylindrical water-filled volume underneath to a point load moving periodically, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 140–147. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.15212>

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

Введение

Организация безопасного регулярного движения автомобильного транспорта по слою льда, покрывающего водоем, требует адекватной математической модели и предварительных численных экспериментов. В первой половине XX века расчеты, связанные с указанной проблемой, строились по упрощенной схеме, согласно которой слой льда опирается на винклеровское основание. Такой подход полностью оправдал себя при организации «Дороги жизни» по льду Ладожского озера. Вместе с тем, при действии больших вертикальных (под тяжестью транспорта) и горизонтальных (под воздействием ветров) нагрузок на лед модель локально упругой поверхности среды под слоем льда может значительно отклоняться от реального положения вещей.

Ледовая переправа, как правило, предполагает периодическое движение автотранспорта. Частота такого движения обычно существенно меньше низшей из собственных частот системы лед-вода и не может повлечь за собой вредные резонансы. Вместе с тем, ритм колебаний силовой установки транспортного средства может сблизиться с собственной частотой системы, а опасный околорезонансный рост амплитуд колебаний следует предотвращать.

В задачах о гравитационных колебаниях водной среды под слоем льда, которые рассматривались в литературе пятьдесят и более лет назад, имели место, как правило, две среды: идеальная несжимаемая жидкость и упругая ледовая пластина. В последние десятилетия все большее внимание в литературе стало уделяться системам, в которых учитывается влияние дополнительных структур, передвигающихся по поверхности пластины.

Пластина считалась бесконечной в работах [1 – 3], полубесконечной в [4, 5], ограниченной в размерах в [6, 7]. Пластина-полоса как ледовое покрытие бесконечно длинного, водонесущего канала рассматривается в статьях [8, 9]. Влияние трещины в пластине на механические процессы учитывается в работах [3, 10]. Возможность целенаправленного разрушения льда под движущейся нагрузкой, в частности, под аппаратом на воздушной подушке, изучена в публикациях [7, 11]. Дополнительные обстоятельства, усложняющие постановку задачи, учитываются в статьях [2] (неровная поверхность пластины) и [12] (слабонелинейная модель). Решение поставленных задач ведется численными методами в работах [1, 3, 7, 11]. Обширный обзор литературы, а также подходов к решению задачи и анализ достигнутых результатов на тему лед-вода-структура содержится в работе [13]. Обзор подтверждает, что задачам, в постановке которых объем водной среды считается конечным, не уделяется пока должного внимания.

Численные методы, при всей их универсальности, характеризуются двумя недостатками, а именно – высоким расходом вычислительных ресурсов и затруднениями при оценке погрешности получаемых результатов. Первый недостаток ослабляется только по мере совершенствования компьютерной техники, которое не зависит от предметного исследователя. Второй недостаток подконтролен исследователю, если погрешности универсаль-

ных численных методов оцениваются путем сравнения с результатами решения частных эталонных задач, допускающих применение аналитических методов.

В данной работе предлагается аналитическое решение задачи о колебаниях водоема ограниченных размеров, покрытого ледовой пластиной, под действием периодически движущейся, точечной нагрузки.

Постановка задачи

Идеальная несжимаемая жидкость заполняет цилиндрический объем радиусом R и высотой H , где, разумеется, целесообразно использовать цилиндрическую систему координат (r, φ, z) :

$$0 \leq r < R, \quad -\pi \leq \varphi < \pi, \quad 0 < z < H.$$

Круглая упругая пластина, покрывающая поверхность жидкости, лежащей вдоль плоскости $z = H$, способна только к изгибным колебаниям.

В отрицательном направлении оси Oz на пластину действует сила p , гармонически изменяющаяся во времени, представленная в виде

$$p(r, \varphi, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_k t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\varphi} \sum_{n=n_m}^{+\infty} p_{kmn} f_{mn}(r),$$

где t – время; ω_k – круговая частота, $\omega_k = 2\pi k / T$ (T – период действия нагрузки); p_{kmn} – заданные постоянные коэффициенты; $f_{mn}(r) = J_m(q_{mn}r) / J_m(j_{mn})$ ($J_m(x)$ – функция Бесселя, $q_{mn} = j_{mn} / R$, j_{mn} – корень уравнения $J'_m(j) = 0$; $J_{00} = 0$); $n_0 = 0$, $n_m = 1$ при $m \neq 0$.

Поле изгибных смещений пластины $w(r, \varphi, t)$ и функция $\psi(r, \varphi, z, t)$, такая, что $\frac{\partial \psi(r, \varphi, z, t)}{\partial t}$ есть потенциал скоростей в жидкости, разыскиваются в виде

$$w(r, \varphi, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_k t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\varphi} \cdot W_{km}(r),$$

$$\psi(r, \varphi, z, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_k t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\varphi} \cdot \Psi_{km}(r, z).$$

Функция $\Psi_{km}(r, z)$ удовлетворяет уравнению

$$\Delta_1 \Psi_{km}(r, z) = 0, \tag{1}$$

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2}.$$

Нижняя ($z = 0$) и боковая ($r = R$) границы объема являются идеально жесткими, т. е.

$$\left. \frac{\partial \Psi_{km}(r, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \tag{2}$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_{km}(r, z)}{\partial r} \right|_{r=R} = 0. \tag{3}$$

Функция $W_{km}(r)$ подчиняется требованию

$$(\Delta_1^2 - \mu_k^4) W_{km}(r) = \nu_k \Psi_{km}(r, H) - \frac{1}{D_1} \sum_{n=0}^{+\infty} p_{kmn} f_{mn}(r), \tag{4}$$

где $\mu_k^4 = (\rho_1 h_1 \omega_k^2 - \rho_0 g) / D_1$ (ρ_1 – плотность материала пластины, h_1 – ее толщина, ρ_0 – плотность жидкости, g – ускорение свободного падения); D_1 – цилиндрическая жесткость, $D_1 = E_1 h_1^3 / (12(1 - \sigma_1^2))$ (E_1 , σ_1 – соответственно, модуль Юнга и коэффициент Пуассона ма-



териала пластины); $v_k = \rho_0 \omega_k^2 / D_1$.

Условие безотрывности смещений пластины и волнений поверхности жидкости имеет вид

$$W_{km}(r) = \left. \frac{\partial \Psi_{km}(r, z)}{\partial z} \right|_{z=H}. \quad (5)$$

Края упругой пластины жестко закреплены, так что

$$\left. \frac{dW_{km}(r)}{dr} \right|_{r=R} = 0, \quad (6)$$

$$W_{km}(R) = 0. \quad (7)$$

Построение решения

Искомые функции следует представить в виде

$$\Psi_{km}(r, z) = \sum_{n=n_m}^{+\infty} \psi_{kmn} f_{mn}(r) \frac{\cosh(q_{mn}z)}{\cosh(q_{mn}H)}, \quad (8)$$

$$W_{km}(r) = W_{km0}(r) + W_{km1}(r), \quad (9)$$

$$W_{km1}(r) = \sum_{n=0}^{+\infty} w_{km1n} f_{mn}(r), \quad (10)$$

$$W_{km0}(r) = C_{km} \frac{R}{4\mu_k^3} \left(\frac{J_m(\mu_k r)}{J'_m(\mu_k R)} - \frac{I_m(\mu_k r)}{I_m(\mu_k R)} \right), \quad (11)$$

$$W_{km0}(r) = C_{km} \sum_{n=n_m}^{+\infty} \frac{\eta_{mn}}{q_{mn}^4 - \mu_k^4} f_{mn}(r), \quad (12)$$

где $\eta_{0n} = 1$, $\eta_{mn} = j_{mn}^2 / (j_{mn}^2 - m^2)$ при $m \neq 0$; ψ_{kmn} , w_{km1n} , C_{km} – неизвестные пока коэффициенты.

Функции $W_{km1}(r)$ отводится роль частного решения неоднородного дифференциального уравнения (4), тогда как функция $W_{km0}(r)$ есть общее решение однородного дифференциального уравнения, соответствующего требованию (4).

Представления (8) – (12) удовлетворяют требованиям (1) – (3), (6).

Правая часть выражения (12) построена разложением правой части (11) в ряд по функциям $f_{mn}(r)$, и равноценна ей, $\forall r \in [0, R]$.

В силу единственности разложения по базису из функций $f_{mn}(r)$, требования (4), (5) означают систему уравнений относительно коэффициентов ψ_{kmn} и w_{km1n} . При этом в уравнение (4) следует подставить выражение (11), тогда как в (5) подставляется выражение (12).

Решение системы позволяет получить следующие формулы:

$$\psi_{kmn} = C_{km} \frac{\eta_{mn}}{\xi_{kmn}} - \frac{p_{kmn}}{\xi_{kmn} D_1}, \quad (13)$$

$$w_{kmn} = C_{km} \eta_{mn} \left(\frac{1}{\xi_{kmn}} - \frac{1}{q_{mn}^4 - \mu_k^4} \right) - \frac{p_{kmn}}{\xi_{kmn} D_1}, \quad (14)$$

$$\xi_{kmn} = q_{mn} \tanh(q_{mn}H) (q_{mn}^4 - \mu_k^4) - v_k.$$

Из выражения (14) следует, что

$$W_{km}(r) = \sum_{n=1}^{+\infty} \left(C_{km} \eta_{mn} - \frac{p_{kmn}}{D_1} \right) \frac{q_{mn} \tanh(q_{mn}H)}{\xi_{kmn}} f_{mn}(r). \quad (15)$$

Слагаемое с $n = 0$ отсутствует в формуле (15) ввиду несжимаемости жидкости в водоеме. Условие (7) постановки задачи позволяет выразить последний из искомых коэффициентов:

$$C_{km} = \frac{1}{D_1} \cdot \left(\sum_{n=1}^{+\infty} \eta_{mn} \frac{q_{mn} \tanh(q_{mn} H)}{\xi_{kmn}} \right)^{-1} \cdot \sum_{n=1}^{+\infty} p_{kmn} \frac{q_{mn} \tanh(q_{mn} H)}{\xi_{kmn}}. \quad (16)$$

Уравнение

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \eta_{mn} \frac{q_{mn} \tanh(q_{mn} H)}{\xi_{kmn}} = 0 \quad (17)$$

служит для поиска собственных частот колебательной системы водоем – ледовая пластина [14, 15].

При возбуждении процессов на собственных частотах амплитуды колебаний с течением времени неограниченно возрастают, что может повлечь разрушение пластины.

Численный эксперимент

Путь односточечной нагрузки, движущейся против часовой стрелки относительно центра пластины, задается соотношениями

$$\begin{cases} r = \alpha(t) \\ \varphi = \beta(t) \end{cases},$$

где $\alpha(t), \beta(t)$ – периодические функции, с периодом T , непрерывные при $t \in (-T/2, T/2)$, такие, что

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -T/2+0} \alpha(t) &= \lim_{t \rightarrow T/2-0} \alpha(t) = R, \\ -\lim_{t \rightarrow -T/2+0} \beta(t) &= \lim_{t \rightarrow T/2-0} \beta(t) = \varphi_0, \\ 0 &< \varphi_0 < \pi, \end{aligned}$$

при этом $-\varphi_0$ есть полярный угол точки входа нагрузки на пластину, а φ_0 есть полярный угол точки схода с нее.

Давление, оказываемое на пластину движущейся точечной нагрузкой, имеет вид

$$p(r, \varphi, t) = F \cdot \delta(r - \alpha(t)) \cdot \delta(\varphi - \beta(t)),$$

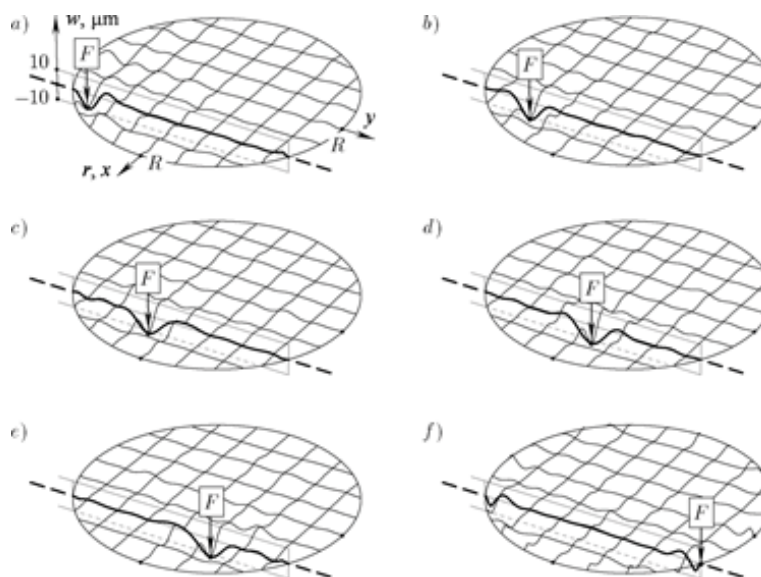
где F – сила, с которой действует нагрузка; $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, следовательно

$$p_{kmn} = F \cdot \left(2\pi TR \int_0^R j_{mn} J_m^2(j_{mn}) \cdot dr \right)^{-1} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} e^{-i\omega_k t} \cdot e^{-im\beta(t)} \cdot \alpha(t) J_m(q_{mn} \alpha(t)) \cdot dt.$$

Давление, оказываемое на пластину несколькими точечными движущимися нагрузками, количество которых равно S , может рассматриваться как сумма односточечных давлений, например, в виде

$$p(r, \varphi, t) = \sum_{s=0}^{S-1} F \cdot \delta(r - \alpha(t - sT/S)) \cdot \delta(\varphi - \beta(t - sT/S)).$$

Расчет проводится для случая равномерного движения нагрузки вдоль хорды пластины, перпендикулярной направлению $\varphi = 0$, на расстоянии $r = A$ от ее центра,



Динамика формы изгибных смещений w пластины радиусом R в моменты времени $t = -3\Delta t$ (a), $-2\Delta t$ (b), $-\Delta t$ (c), 0 (d), Δt (e), $T/2$ (f), где $\Delta t = T / (4\sqrt{3})$

$$\alpha(t) = \sqrt{A^2 + (2Bt/T)^2}, \quad \beta(t) = \arctan(2Bt/(AT)), \quad B = \sqrt{R^2 - A^2}.$$

Выбранные значения геометрических и физических параметров таковы:

$$R = 1000 \text{ м}, H = 10 \text{ м}, A = 500 \text{ м}, h_1 = 0,2 \text{ м};$$

$$T = 1000 \text{ с}, F = 1 \text{ Н}, E_1 = 3 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2;$$

$$\sigma_1 = 0,3, \rho_1 = 919,4 \text{ кг/м}^3, \rho_0 = 1000 \text{ кг/м}^3.$$

На рисунке показаны формы изгибных смещений пластины. Декартова система координат Oxy стандартным образом совмещена с полярной системой координат $Or\varphi$. Стрелками, направленными вертикально вниз, отмечены точки приложения движущейся нагрузки.

Выводы

Построено аналитическое решение задачи об определении вибрационного поля изгибных смещений пластины $w(r, \varphi, t)$ под действием точечной нагрузки, периодически движущейся по пластине. Полученное представление для поля позволяет (при необходимости оценки прочности пластины) находить величины изгибающих моментов и сдвиговых сил.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Chen K., Tong X. F.** Numerical solution of dynamic responses of moving load on ice sheet // Applied Mechanics and Materials. 2011. Vol. 138–139. November. Pp. 44–49.
2. **Chatterjee M., Chattopadhyay A.** Effect of moving load due to irregularity in ice sheet floating on water // Acta Mechanica. 2017. Vol. 228. No. 5. Pp. 1749–1765.
3. **Xue Y. Z., Zeng L. D., Ni B. Y., Korobkin A. A., Khabakhpasheva T. I.** Hydroelastic response of an ice sheet with a lead to a moving load // Physics of Fluids. 2021. Vol. 33. No. 3. P. 037109.
4. **Коузов Д. П.** Рассеяние гравитационной волны на кромке плавающей пластины // Труды XXV–XXVI летних школ «Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем». Т. 2. 1998. СПб.: Ин-т проблем машиноведения РАН. С. 356–364.

5. Стурова И. В. Действие периодического поверхностного давления на ледовый покров в окрестности вертикальной стенки // Прикладная механика и техническая физика. 2017. Т. 58. № 1. С. 92–101.
6. Стурова И. В. Влияние периодического поверхностного давления на прямоугольную упругую пластину, плавающую на мелководье // Прикладная математика и механика. 2006. Т. 70. № 3. С. 417–426.
7. Жесткая В. Д., Джабраилов М. Р. Численное решение задачи о движении нагрузки по ледяному покрову с трещиной // Прикладная механика и техническая физика. 2008. Т. 49. № 3 (289). С. 473–477.
8. Shishmarev K., Khabakhpasheva T., Korobkin A. The response of ice cover to a load moving along a frozen channel // Applied Ocean Research. 2016. Vol. 59. September. Pp. 313–326.
9. Khabakhpasheva T., Shishmarev K., Korobkin A. Large-time response of ice cover to a load moving along a frozen channel // Applied Ocean Research. 2019. Vol. 86. May. Pp. 154–165.
10. Марченко А. В. Дифракция поверхностных волн на трещине в ледяном покрове // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 1993. № 2. С. 93–102.
11. Li Y., Liu J., Hu M., Zhang Z. Numerical modeling of ice-water system response based on Rankine source method and finite difference method // Ocean Engineering. 2017. Vol. 138. 1 July. 1. Pp. 1–8.
12. Dinvay E, Kalisch H., Părău E. I. Fully dispersive models for moving loads on ice sheets // Journal of Fluid Mechanics. 2019. Vol. 876. 10 October. Pp. 122–149.
13. Ni B., Han, D., Di, S., Xue Y. On the development of ice-water-structure interaction // Journal of Hydrodynamics. 2020. Vol. 32. No. 4. Pp. 629–652.
14. Лавров Ю. А. О свободных гравитационных колебаниях жидкости, заполняющей прямоугольный контейнер с жесткими стенками и упругой крышкой // Труды XXV–XXVI летних школ «Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем». Т. 2. 1998. СПб.: Ин-т проблем машиноведения РАН. С. 348–355.
15. Лавров Ю. А. О гравитационных колебаниях жидкости, заполняющей цилиндрический контейнер с упругой крышкой // Труды международной конференции «Численные и аналитические методы расчета конструкций». Самара: Самарская государственная академия строительства и архитектуры, 1998. С. 104–108.

REFERENCES

1. Chen K., Tong X. F., Numerical solution of dynamic responses of moving load on ice sheet, Appl. Mech. Mater. 138–139 (2011) 44–49.
2. Chatterjee M., Chattopadhyay A., Effect of moving load due to irregularity in ice sheet floating on water, Acta Mech. 228 (5) (2017) 1749–1765.
3. Xue Y. Z., Zeng L. D., Ni B. Y., et al., Hydroelastic response of an ice sheet with a lead to a moving load, Phys. Fluids. 33 (3) (2021) 037109.
4. Kouzov D. P., Rasseyaniye gravitatsionnoy volny na kromke plavayushchey plastiny [Scattering of a gravitational wave at the edge of a floating plate], Transactions of the 25-th – 26-th Summer Schools "Analysis and Synthesis of Nonlinear Mechanical Oscillatory Systems", 1998. Institute of Problems of Mechanical Engineering, RAS, St. Petersburg; Vol. 2 (1998) 356–364 (in Russian).
5. Sturova I. V., Action of periodic surface pressure on an ice cover in the vicinity of a vertical wall, J. Appl. Mech. Techn. Phys. 58 (1) (2017) 80–88.
6. Sturova I. V., The effect of periodic surface pressure on a rectangular elastic plate floating on shallow water, J. Appl. Math. Mech. 70 (3) (2006) 378–386.
7. Zhestkaya V. D., Dzhabrailov M. R., Numerical solution of the problem of motion of a load on a cracked ice sheet, J. Appl. Mech. Techn. Phys. 49 (3) (2008) 473–477.
8. Shishmarev K., Khabakhpasheva T., Korobkin A., The response of ice cover to a load moving along a frozen channel, Appl. Ocean Res. 59 (September) (2016) 313–326.
9. Khabakhpasheva T., Shishmarev K., Korobkin A., Large-time response of ice cover to a load moving along a frozen channel, Appl. Ocean Res. 86 (May) (2019) 154–165.
10. Marchenko A. V., Surface wave diffraction at a crack in sheet ice, Fluid Dynamics. 28 (2) (1993) 230–237.



11. Li Y., Liu J., Hu M., Zhang Z., Numerical modeling of ice-water system response based on Rankine source method and finite difference method, *Ocean Engineering*. 138 (1 July) (2017) 1–8.
12. Dinvey E, Kalisch H., Părău E. I., Fully dispersive models for moving loads on ice sheets, *J. Fluid Mechanics*. 876 (10 October) (2019) 122–149.
13. Ni B., Han D., Di S., Xue Y., On the development of ice-water-structure interaction, *J. Hydrodyn.* 32 (4) (2020) 629–652.
14. Lavrov Yu. A., О свободных гравитационных колебаниях жидкости, заполняющей прямоугольный контейнер с жесткими стенками и упругой крышкой [On free gravitational vibrations of liquid filling a rectangular container with rigid walls and an elastic cover], *Transactions of the 25- th – 26-th Summer Schools "Analysis and Synthesis of Nonlinear Mechanical Oscillatory Systems"*, 1998, Institute of Problems of Mechanical Engineering, RAS, St. Petersburg; Vol. 2 (1998) 348–355 (in Russian).
15. Lavrov Yu. A., О гравитационных колебаниях жидкости, заполняющей цилиндрический контейнер с упругой крышкой [On gravitational oscillations of liquid filling a cylindrical container with an elastic cover], *Transactions of the International Conference "Numerical and Analytical Methods for Structures Design"*, Samara State Academy of Architecture and Civil Engineering, Samara (1998) 104–108 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЛАВРОВ Юрий Аркадьевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lyamm06@rambler.ru
ORCID: 0000-0001-9626-0461

THE AUTHOR

LAVROV Yury A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lyamm06@rambler.ru
ORCID: 0000-0001-9626-0461

Статья поступила в редакцию 20.03.2022. Одобрена после рецензирования 12.04.2022. Принята 12.04.2022.

Received 20.03.2022. Approved after reviewing 12.04.2022. Accepted 12.04.2022.

Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 15, № 2, 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 ПИИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцурижнская* – 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

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 двоянными 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