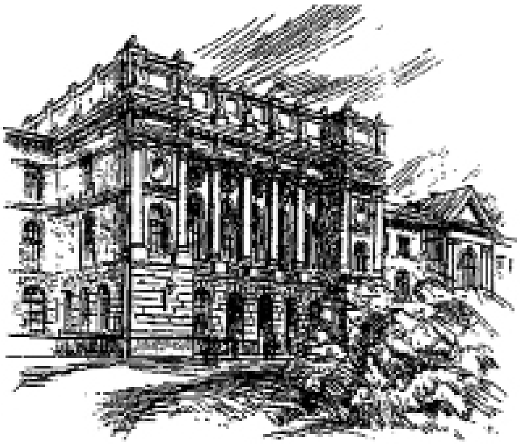
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 16, №4
2023

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2023

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;
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 ВИНИТИ 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.

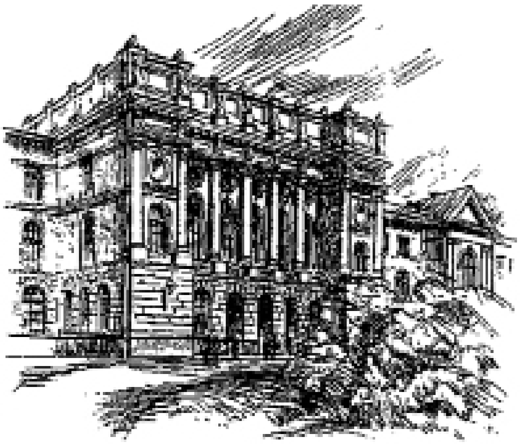
Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.
http://ntv.spbstu.ru/physics

© Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2023

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

**VOLUME 16, No.4,
2023**

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2023

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;
VA.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.

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, 2023

Содержание

Физика конденсированного состояния

Математическое моделирование физических процессов

Математическая физика

Приборы и техника физического эксперимента

Физическая электроника

Физическое материаловедение

Биофизика и медицинская физика

Ядерная физика

Радиофизика

Математика

Contents

Condensed matter physics

Simulation of physical processes

Mathematical physics

Experimental technique and devices

Physical electronics

Physical materials technology

Biophysics and medical physics

Nuclear physics

Radiophysics

Mathematics

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Физика конденсированного состояния

Научная статья
УДК 538.91
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16401

ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРОВСКИТНЫХ ПЛЕНОК $MaPbI_3$, СФОРМИРОВАННЫХ ОДНОСТАДИЙНЫМ МЕТОДОМ ЦЕНТРИФУГИРОВАНИЯ

М. К. Овезов [1] ✉, А. А. Рябко [1], А. Н. Алешин [1],
В. А. Мошников [2], В. М. Кондратьев [3, 4], А. И. Максимов [2]

[1] Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;
[2] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия;
[3] Академический университет имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;
[4] Московский физико-технический институт
(Национальный исследовательский университет), Москва, Россия
✉ strontiumx94@gmail.com

Аннотация. В работе исследованы свойства пленок $MaPbI_3$, изготовленных с применением осадителя либо без него. Образцы обладали планарной геометрией на основе керамических подложек со встречно-штыревыми золотыми электродами, а также на основе стеклянных подложек. Образцы облучали зеленым светом от светодиодного источника, а для измерения вольтамперных характеристик использовали специальную установку. Поликристаллические пленки продемонстрировали высокую фоточувствительность (увеличение тока примерно на 2 порядка при облучении). Ширина их оптической запрещенной зоны была одинаковой вне зависимости от использования осадителя, однако предельные напряжения заполнения ловушек оказались весьма чувствительными к такому использованию. По данным оптической микроскопии, для микроструктуры пленки характерно образование крупных дендритных структур, т. е. при ее изготовлении происходило зародышеобразование в толще раствора. Этот механизм может быть удобным для использования пленок $MaPbI_3$ в фотодетекторах.

Ключевые слова: металлорганический перовскит, полупроводящий полимер, механизм транспорта, солнечный элемент

Финансирование: Исследование проведено при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 23-42-10029; https://rscf.ru/en/project/23-42-10029/.

Для цитирования: Овезов М. К., Рябко А. А., Алешин А. Н., Мошников В. А., Кондратьев В. М., Максимов А. И. Вольтамперные характеристики перовскитных пленок $MaPbI_3$, сформированных одностадийным методом центрифугирования // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 9–19. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16401

Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16401

CURRENT – VOLTAGE CHARACTERISTICS OF $MaPbI_3$ PEROVSKITE FILMS FORMED BY THE SINGLE-STAGE SPIN-COAT METHOD

M. K. Ovezov [1] ✉, A. A. Ryabko [1], A. N. Aleshin [1],
V. A. Moshnikov [2], V. M. Kondratyev [3, 4], A. I. Maximov [2]

[1] Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia;

[2] St. Petersburg Electrotechnical University "LETI", St. Petersburg, Russia;

[3] Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia;

[4] Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Moscow, Russia

✉ strontiumx94@gmail.com

Abstract. In the paper, the properties of $MaPbI_3$ films made with or without a precipitant have been investigated. The samples had a planar geometry based on ceramic substrates with interdigitated gold electrodes and also based on glass substrates. The samples were irradiated with green light from a LED source, and a special setup was used to measure current–voltage (I–V) characteristics. The polycrystalline films exhibited high sensitivity (an increase in current by about 2 orders upon irradiation). The width of their optical band gap was the same regardless of the use of the precipitant but the maximum trap-filling voltages turned out to be very sensitive to such use. According to optical microscopy, the film microstructure was characterized by a growth of large long dendritic structures, i. e., the nucleation occurred in the solution mass during the films' making. This growth mechanism may be convenient for the use of $MaPbI_3$ films in photodetectors.

Keywords: organometallic perovskite, semiconducting polymer, transport mechanism, solar cell

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-42-10029; https://rscf.ru/en/project/23-42-10029/).

For citation: Ovezov M. K., Ryabko A. A., Aleshin A. N., Moshnikov V. A., Kondratyev V. M., Maximov A. I., Current – voltage characteristics of $MaPbI_3$ perovskite films formed by the single-stage spin-coat method, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 9–19. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16401

Введение

Металлорганические перовскиты, такие как $(Fa)(Ma)MX_3$, где Fa – формамидиний $CH(NH_2)_2$, Ma – метиламмониум CH_3NH_3, металл M = Pb, галоген X = Br или I, в последние годы привлекают все большее внимание для применения в солнечных элементах (СЭ) и фотодетекторах, детекторах рентгеновского излучения, а также мемристорных структурах [1 – 3]. СЭ на основе металлоорганических перовскитов демонстрируют эффективность, сравнимую с кремниевыми солнечными элементами (25,8 %) [4]. Для использования в СЭ, помимо пленок металлоорганических перовскитов, применяются пленки неорганических перовскитов $CsPbX_3$ [5]. При этом перовскитные пленки $CsPbX_3$ формируют не только из раствора, но также из суспензий коллоидных квантовых точек, использование которых позволяет управлять спектром поглощения СЭ, регулируя размеры квантовых точек [6 –8]. Стоит также отметить растущий интерес к бессвинцовым перовскитным материалам, связанный, в первую очередь, с их низкой токсичностью [9]. Несмотря на то, что СЭ на основе бессвинцовых перовскитов демонстрируют меньшие значения КПД, по сравнению со свинцовыми (примерно на 6 %), показатели их стабильности вплотную приближаются к 2 тыс. часам работы в азотной атмосфере [10]. Наконец, перспективным направлением является создание тандемных структур на основе различных СЭ в сочетании с перовскитными фотовольтаическими элементами [11].

Среди перечисленных материалов со структурой перовскита для создания СЭ наиболее успешно применяется металлоорганический перовскит $CH_3NH_3PbI_3$ (далее используется обозначение $MaPbI_3$), который также широко используется для создания фотодетекторов и детекторов рентгеновского излучения. В последнее время для указанных детекторов применяют перовскит $MaPbI_3$ в виде монокристалла, демонстрирующий плотность ловушечных состояний порядка 10^{10} см$^{-3}$ и длину диффузии носителей заряда, превышающую 175 мкм [12, 13]. Хотя монокристаллический перовскит $MaPbI_3$ также применим для создания фотовольтаических структур, сложность создания монокристалла большого диаметра делает его использование для СЭ экономически нецелесообразным. Для создания СЭ используют поликристаллические пленки, которые наносят из раствора такими методами, как распылением, струйной и трафаретной печатью, центрифугированием и другими [14].

Как правило, поликристаллические слои $MaPbI_3$ наносят методом центрифугирования в две стадии, если растворы PbI_2 и CH_3NH_3I наносят раздельно, либо за один прием, если наносится раствор $CH_3NH_3PbI_3$. Изготовители материалов отмечают, что двустадийный метод позволяет получать более однородные пленки, но он более сложен технологически, тогда как пленки, изготовленные двумя разными методами, демонстрируют сравнимые показатели, причем некоторые (например, размер зерна) лучше у пленок, приготовленных одностадийным методом [15, 16].

Анализ имеющихся сведений позволил нам сделать выбор в пользу одностадийного метода. Часто при нанесении пленки используется осадитель, что позволяет добиться значительного повышения качества пленки [17 – 19]. В качестве осадителя можно использовать многие реагенты, но среди них выделяется этилацетат (EA), использование которого позволяет достичь достаточно высокого КПД фоточувствительного слоя (до 19,53 %). Кроме того, этот слой способен сохранять до 84,8 % изначальной эффективности при работе СЭ в условиях воздушной атмосферы в течение долгого времени (более 1900 ч) [20]. Отдельно стоит отметить сравнительно низкие стоимость и токсичность этилацетата, что значительно повышает его перспективность для коммерческого применения.

В данной работе исследовалось влияние технологии изготовления перовскитной пленки MaPbI на ее вольтамперные характеристики в планарных структурах, причем эта технология предусматривала внесение этилацетата в процессе одностадийной процедуры.

Материалы и методы

Для приготовления образцов использовались порошки металлоорганических перовскитов $MaPbI_3$, приобретенные в корпорации «Сиань полимер лайт технолоджи корп.» (КНР). Пленки наносили методом центрифугирования из раствора диметилформамида и диметилсульфоксида (объемное соотношение 4:1) с массовой концентрацией $MaPbI_3$ 300 мг/мл с дальнейшим отжигом при температуре 110 °С в течение 10 мин. Скорость центрифугирования составляла 3000 об/мин (в течение 30 с) с предварительным центрифугированием на скорости 1000 об/мин (10 с). Образцы были получены двумя способами: с использованием этилацетата в качестве осадителя и без него. Введение осадителя осуществлялось на быстрой стадии центрифугирования.

Для измерения вольтамперных характеристик перовскитные пленки наносили на керамические подложки со встречно-штыревыми золотыми электродами (сенсорная платформа, “Tesla Blatna” АО Чехия). Толщина электродов и расстояние между ними составляло 25 мкм (рис. 1).

Для исследования морфологии образцов методами оптической и растровой электронной микроскопии слои перовскитной пленки $MaPbI_3$ наносили также на кремниевые подложки. Для определения ширины запрещенной зоны через обработку спектров оптического поглощения, такие слои наносились и на стеклянные подложки с покрытием ITO. Последнее представляет собой раствор, состоящий из индия (indium), кислорода (oxigen)

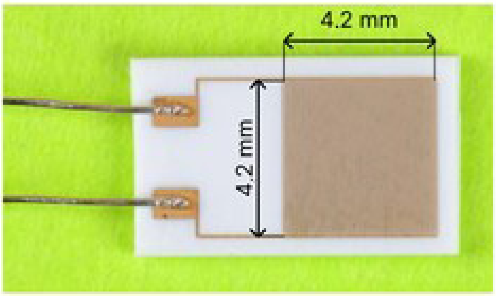


Рис. 1. Фотография керамической подложки с встречно-штыревыми электродами NiCr/Ni/Au (сенсорная платформа, “Tesla Blatna”). Размер области с этими электродами – 4,2 × 4,2 мм

и олова (tin), т. е. оксида индия In_2O_3 и оксида олова Sn_2O_3.

Вольтамперные характеристики (ВАХ) образцов были измерены на пикоамперметре Keithley 6487 (США) в условиях темноты и при облучении светодиодным источником с длиной волны 535 нм. Измерения спектров поглощения производились на спектрофотометре ПЭ-5400УФ (Россия). Микроструктура объектов исследовались с помощью поляризационного микроскопа ПОЛАМ-312 (Россия). Морфология покрытий исследовалась также с помощью растрового электронного микроскопа Zeiss Supra 25 (Германия).

Результаты и их обсуждение

Полученные в работе образцы тонких поликристаллических пленок $MaPbI_3$ демонстрировали характерный спектр оптического поглощения (кривая *1* на рис. 2,*a*). Оптическую ширину запрещенной зоны образцов определяли в координатах Тауца – $(\alpha h\nu)^{1/r}$ от $h\nu$ – путем экстраполяции линейного участка на ось абсцисс, где значение r выражает тип зависимости коэффициента поглощения полупроводника от длины волны облучения (большей края поглощения полупроводника). Поскольку $MaPbI_3$ является прямозонным полупроводником, коэффициент поглощения описывается корневой зависимостью от длины волны ($r = 1/2$).

Согласно полученным результатам, оптическая ширина запрещенной зоны E_g изготовленных пленок составила $E_g \approx 1{,}58$ эВ, причем это значение не зависело от использования осадителя; оно является характерным для поликристаллических пленок $MaPbI_3$.

Результаты измерений ВАХ в темноте и при световом облучении показаны на рис. 3 и 4. Воздействие на образцы светового излучения зеленого цвета приводит к изменению тока приблизительно на два порядка, при этом использование осадителя не оказывает заметного влияния. Вольтамперные характеристики в темноте демонстрируют гистерезис, что связано с миграцией ионов (преимущественно это ионы I^-), а также с режимом тока, ограниченного пространственным зарядом [20]. В то же время наблюдается влияние тех-

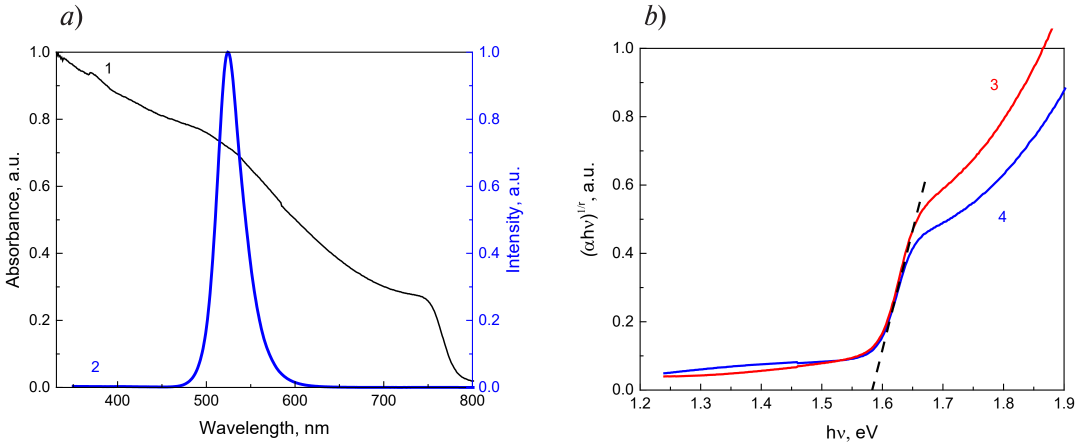


Рис. 2. Результаты исследования слоев $MaPbI_3$ (кривая *1* на рис. 2,*a* и кривые *3*, *4* на рис. 2,*b*), а также светодиода (кривая *2* на рис. 2,*a*):

1 – типичный спектр оптического поглощения; *3*, *4* – спектры оптического поглощения в координатах Тауца для определения оптической ширины запрещенной зоны; представлены зависимости для образцов, приготовленных с применением осадителя (*3*) и без него (*4*); *2* – спектр электролюминесценции зеленого светодиода, использованный для регистрации фотоотклика образцов нологии изготовления образцов: различаются значения предельного напряжения заполнения ловушек V_{TFL} для образцов, полученных с применением осадителя и без него.

Мы также обнаружили некоторое повышение величины V_{TFL} после светового облучения образцов (использован светодиод зеленого свечения), что указывает на увеличение концентрации ловушек во время экспозиции.

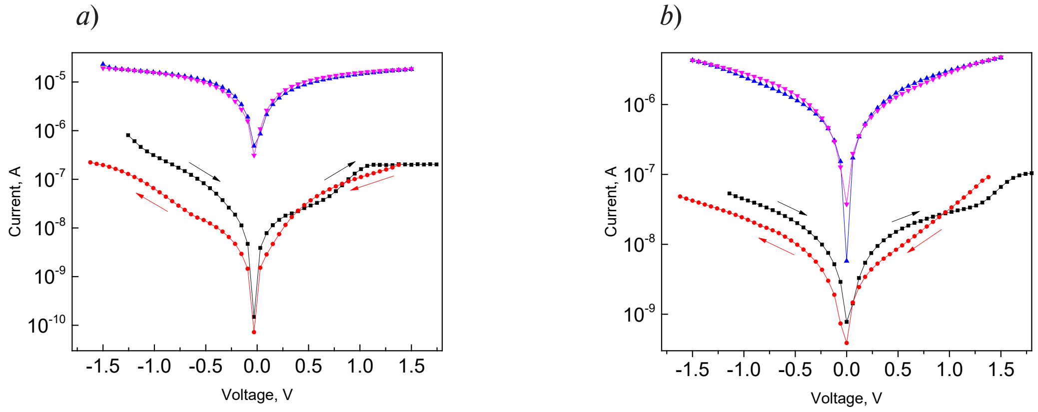


Рис. 3. ВАХ образцов, приготовленных без использования осадителя (*a*) и с его использованием (*b*) в условиях темноты (нижние кривые) и светового облучения зеленого цвета (верхние). Стрелками показаны режимы изменения напряжения, приложенного к образцам

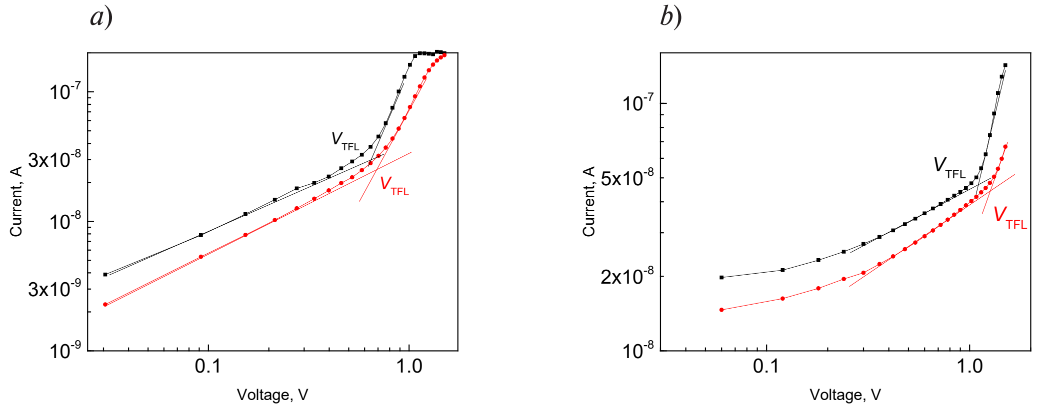


Рис. 4. Фрагменты ВАХ образцов, приготовленных без использования осадителя (*a*) и с его использованием (*b*) в условиях темноты, созданной до (кривые черного цвета) и после (красного цвета) светового облучения. Наблюдается разница в значениях V_{TFL}

В работе [20] отмечается, что подобное облучение может значительно ускорить или вызвать миграцию ионов и такая миграция наблюдается в широком температурном диапазоне. Сообщается также о снижении примерно в пять раз энергии активации миграции ионов (с 0,82 до 0,15 эВ при увеличении интенсивности светового излучения от 0 до 20 мВт/см^2) [21].

Предельное напряжение заполнения ловушек V_{TFL} прямо пропорционально их концентрации:

$$V_{\mathrm{TFL}} = \frac{eN_t L^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}, \tag{1}$$

где e – заряд электрона, N_t – концентрация ловушек, L – расстояние между электродами (25 мкм для нашего случая), ε – диэлектрическая проницаемость материала (для $\mathrm{MaPbI_3}$ $\varepsilon = 32$), ε_0 – диэлектрическая постоянная [18].

Отсюда концентрацию ловушек можно рассчитать по формуле

$$N_t = \frac{2\varepsilon\varepsilon_0 V_{\mathrm{TFL}}}{eL^2}. \tag{2}$$

Для напряжения V_{TFL}, равного приблизительно 0,65 – 0,70 В для образца без осадителя и около 1,13 – 1,30 В для образца с осадителем, были получены значения N_t, равные (10^{14} см$^{-3}$): 3,68, 3,81, 6,09 и 7,01, соответственно.

Значения V_{TFL}, а значит и концентрации ловушек, оказались меньше для образца, полученного без осадителя, что не согласуется с литературными данными [16, 22].

Результаты растровой электронной микроскопии (рис. 5,*c*, *d*) показали, что использование осадителя (этилацетата) в данных условиях приводит к увеличению размеров кристаллитов пленки, по сравнению с пленкой без использования осадителя. Также в пленках наблюдаются поры, вызванные условиями испарения растворителя. Согласно данным оптической микроскопии (рис. 5,*a*) образца, полученного с осадителем, наблюдаются области подложки, не покрытые перовскитной пленкой, однако области, покрытые пленкой $MaPbI_3$, – однородны. В то же время для образца, полученного без использования осадителя, наблюдается не только гетерогенное зародышеобразование на интерфейсе с подложкой, но и рост крупных вытянутых (~ 50 мкм) дендритных структур (рис. 5,*d*).

Очевидно, что при нагреве испарение растворителя из раствора $MaPbI_3$ может приводить к увеличению концентрации растворенного вещества в приповерхностной области. Также градиент температуры от поверхности подложки к поверхности пленки приводит к снижению растворимости пленки $MaPbI_3$ в приповерхностной области.

Таким образом, обеспечиваются условия нуклеации в приповерхностной области пленки раствора с последующим ростом дендритных структур. В то же время энергетически выгодна нуклеация на границе раздела фаз, которая обусловливает рост

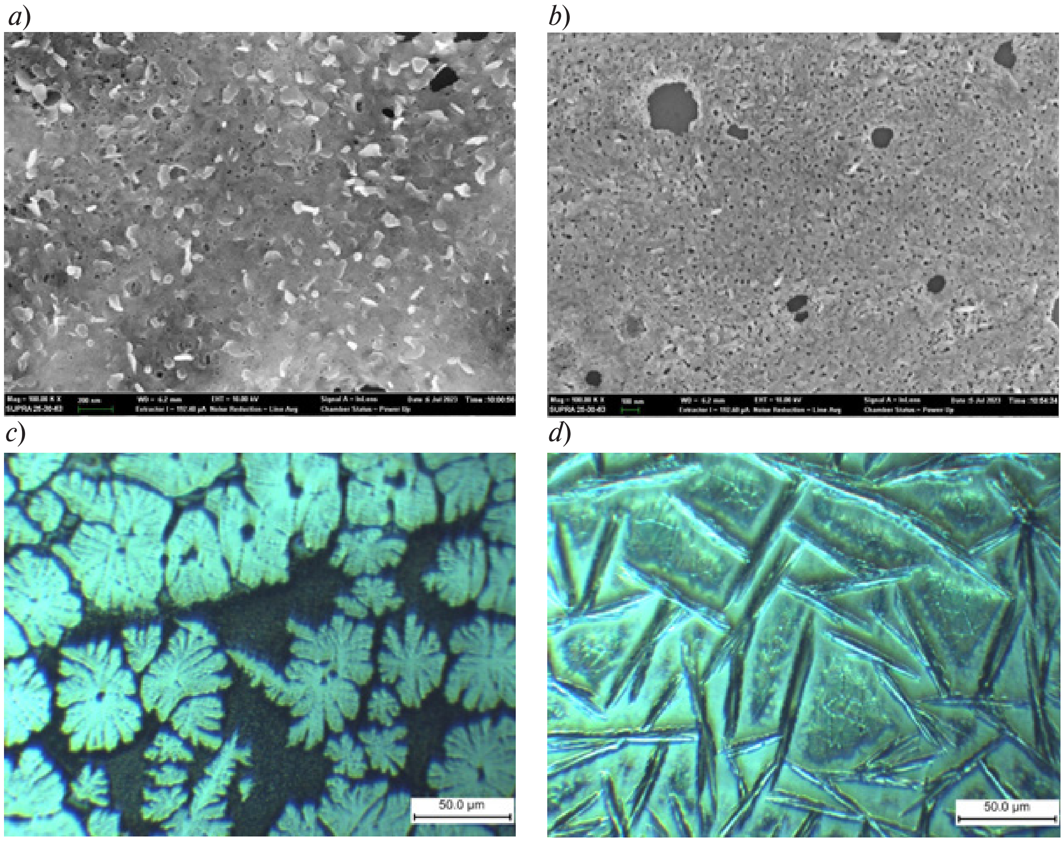


Рис. 5. Микрофотографии слоев $MaPbI_3$ для образцов, приготовленных с использованием осадителя (*a*, *c*) и без него (*b*, *d*), полученные методами оптической (*a*, *b*) и растровой электронной (*c*, *d*) микроскопии

поликристаллической пленки непосредственно на поверхности подложки (рис. 5,*b*). Следовательно, осадитель приводит к увеличению размеров кристаллитов пленки, сформированных на границе раздела фаз, однако условия роста пленки без использования осадителя приводят к росту вытянутых структур $MaPbI_3$ большего масштаба.

Хотя условия формирования пленок при использовании полированной поверхности кремниевых подложек и керамических подложек различны ввиду различной концентрации позиций нуклеации на поверхности подложки и гидрофобности, мы предполагаем, что особенности формирования пленок должны быть аналогичны. Таким образом, пленка, состоящая из вытянутых структур, имеет меньшую концентрацию границ зерен, что приводит к снижению концентрации ловушек и напряжения V_{TFL}. Хотя такой механизм роста негативным образом сказывается на использовании поликристаллической пленки в фотовольтаических структурах, он может оказаться удобным для использования пленок $MaPbI_3$ в фотодетекторах. В то же время использование осадителя предпочтительно с точки зрения морфологии такой пленки для создания фотовольтаических структур.

Выводы

Изготовленные для исследования пленки металлоорганического перовскита $MaPbI_3$ демонстрируют высокий отклик на световое облучение в видимой области спектра (на излучение зеленого цвета светодиодом), а также на характерный режим тока, ограниченного пространственными зарядами. Темновые вольтамперные характеристики (ВАХ) демонстрируют гистерезис, обусловленный миграцией ионов.

Было обнаружено, что пленки $MaPbI_3$, приготовленные по описанной методике без использования осадителя, содержат крупные дендритные структуры, обеспечивающие снижение предельного напряжения заполнения ловушек. Мы предполагаем, что такая морфология пленок может способствовать их успешному использованию в качестве фотодетекторов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sakhatskyi K., Türedi B., Matt G. J., et al.** Stable perovskite single-crystal X-ray imaging detectors with single-photon sensitivity // Natural Photonics. 2023. Vol. 17. June. Pp. 510–517.

2. **Wang H., Sun Y., Chen J., Wang F., Han R., Zhang C., Kong J., Li L., Yang J. A.** Review of perovskite-based photodetectors and their applications // Nanomaterials. 2022. Vol. 12. No. 24. P. 4390.

3. **Nenashev G. V., Aleshin A. N., Shcherbakov I. P., Petrov V. N.** Effect of temperature variations on the behavior of a two-terminal organic-inorganic halide perovskite rewritable memristor for neuromorphic operations // Solid State Communications. 2022. Vol. 348–349. 1 June. P. 114768.

4. **Roy P., Ghosh A., Barclay F., Khare A., Cuce E.** Perovskite solar cells: A review of the recent advances // Coatings. 2022. Vol. 12. No. 8. P. 1089.

5. **Wang J., Zhang J., Zhou Y., Liu H., Xue Q., Li X., Jen A. K.** Highly efficient all-inorganic perovskite solar cells with suppressed non-radiative recombination by a Lewis base // Nature Communications. 2020. Vol. 11. January. P. 177.

6. **Sadhu A. S., Huang Y.-M., Chen L.-Y., Kuo H.-C., Lin C.-C.** Recent advances in colloidal quantum dots or perovskite quantum dots as a luminescent downshifting layer embedded on solar cells // Nanomaterials. 2022. Vol. 12. No. 6. P. 985.

7. **Srivastava A. K., Zhang W., Schneider J., Halpert J. E., Rogach A. L.** Luminescent down-conversion semiconductor quantum dots and aligned quantum rods for liquid crystal displays // Advanced Science. 2019. Vol. 6. No. 22. P. 1901345.

8. **Александрова О. А., Галиева Д. М., Дробинцева А. О. и др.** Наночастицы, наносистемы и их применение. Ч. 1. Коллоидные квантовые точки. Под ред. В. А. Мошникова, О. А. Александровой. Уфа: Аэтерна, 2015. 236 с.

9. **Shi Z. J., Guo J., Chen Y. H., Li Q., Pan Y. F., Zhang H. J., Xia Y. D., Huang W.** Lead-free organic-inorganic hybrid perovskites for photovoltaic applications: Recent advances and perspectives // Advanced Materials. 2017. Vol. 29. No. 16. 3 February. P. 1605005.

10. **Gao W., Ran C., Li J., Dong H., Jiao B., Zhang L., Lan X., Hou X., Wu Z.** Robust stability of efficient lead-free formamidinium tin iodide perovskite solar cells realized by structural regulation // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2018. Vol. 9. No. 24. Pp. 6999–7006.

11. **Li H., Zhang W.** Perovskite tandem solar cells: From fundamentals to commercial deployment // Chemical Reviews. 2020. Vol. 120. No. 18. Pp. 9835–9950.

12. **Rong Sh.-Sh., Faheem M. B., Li Y.-B.** Perovskite single crystals: Synthesis, properties, and applications // Journal of Electronic Science and Technology. 2021. Vol. 19. No. 2. P. 100081.

13. **Lian Zh., Yan Q., Gao T., Ding J., Lv Q., Ning Ch., Li Q., Sun J.-L.** Perovskite $CH_3NH_3PbI_3$(Cl) single crystals: Rapid solution growth, unparalleled crystalline quality, and low trap density toward 10^8 cm^{-3}// Journal of the American Chemical Society. 2016. Vol. 138. No. 30. Pp. 9409–9412.

14. **Zhang Y., Zhang H., Zhang X., Wei L., Zhang B., Sun Y., Hai G., Li Y.** Major impediment to highly efficient, stable and low-cost perovskite solar cells // Metals. 2018. Vol. 8. No. 11. P. 964.

15. **Xiao M., Huang F., Huang W., Dkhissi Y., Zhu Y., Etheridge J., Gray-Weale A., Bach U., Cheng Y., Spiccia L.** A fast deposition-crystallization procedure for highly efficient lead iodide perovskite thin-film solar cells // Angewandte Chemie International Edition. 2014. Vol. 53. No. 37. Pp. 9898–9903.

16. **Ahmed D. S., Mohammed B. K., Mohammed M. K. A.** Long-term stable and hysteresis-free planar perovskite solar cells using green antisolvent strategy // Journal of Materials Science. 2021. Vol. 56. No. 27. Pp. 15205–15214.

17. **Shaikh J. S., Shaikh N. S., Sheikh A. D., Mali S. S., Kale A. J., Kanjanaboos P., Hong C. K., Kim J. H., Patil P. S.** Perovskite solar cells: In pursuit of efficiency and stability // Materials & Design. 2017. Vol. 136. 15 December. Pp. 54–80.

18. **Li D., Shi J., Xu Y., Luo Y., Wu H., Meng Q.** Inorganic-organic halide perovskites for new photovoltaic technology // National Science Review. 2018. Vol. 5. No. 4. Pp. 559–576.

19. **Zhang W., Li Y., Liu X., Tang D., Li X., Yuan X.** Ethyl acetate green antisolvent process for high-performance planar low-temperature SnO_2-based perovskite solar cells made in ambient air // Chemical Engineering Journal. 2020. Vol. 379. 1 January. P. 122298.

20. **Zhang P., Gu N., Song L., Chen X., Du P., Zha L., Chen W.-Hs., Xiong J.** The disappearing additive: introducing volatile ethyl acetate into a perovskite precursor for fabricating high efficiency stable devices in open air // Nanoscale. 2022. Vol. 14. No. 13. Pp. 5204–5213.

21. **Khan R., Ighodalo K. O., Xiao Z.** Ion migration in metal halide perovskites solar cells, soft-matter thin film solar cells: Physical processes and device simulation. Melville, New York: AIP Publishing LLC, 2020. Pp. 1–283.

22. **Zhao Y.-C., Zhou W.-K., Zhou X., Liu K.-H., Yu D.-P., Zhao K.** Quantification of light-enhanced ionic transport in lead iodide perovskite thin films and its solar cell applications // Light: Science & Applications. 2017. Vol. 6. No. 5. 5 May. P. e16243.

REFERENCES

1. **Sakhatskyi K., Türedi B., Matt G. J., et al.,** Stable perovskite single-crystal X-ray imaging detectors with single-photon sensitivity, Nat. Photon. 17 (June) (2023) 510–517.

2. **Wang H., Sun Y., Chen J., et al.,** Review of perovskite-based photodetectors and their applications, Nanomater. 12 (24) (2022) 4390.

3. **Nenashev G. V., Aleshin A. N., Shcherbakov I. P., Petrov V. N.,** Effect of temperature variations on the behavior of a two-terminal organic-inorganic halide perovskite rewritable memristor for neuromorphic operations, Solid State Commun. 348–349 (1 June) (2022) 114768.

4. **Roy P., Ghosh A., Barclay F., et al.,** Perovskite solar cells: A review of the recent advances, Coat. 12 (8) (2022) 1089.

5. **Wang J., Zhang J., Zhou Y., et al.,** Highly efficient all-inorganic perovskite solar cells with suppressed non-radiative recombination by a Lewis base, Nat. Commun. 11 (Jan) (2020) 177.

6. **Sadhu A. S., Huang Y.-M., Chen L.-Y., et al.,** Recent advances in colloidal quantum dots or perovskite quantum dots as a luminescent downshifting layer embedded on solar cells, Nanomater. 12 (6) (2022) 985.

7. **Srivastava A. K., Zhang W., Schneider J., et al.,** Luminescent down-conversion semiconductor quantum dots and aligned quantum rods for liquid crystal displays, Adv. Sci. 6 (22) (2019) 1901345.

8. **Aleksandrova O. A., Galieva D. M., Drobinceva A. O., et al.,** Nanochastitsy, nanosistemy i ikh primeneniye. Ch.1. Kolloidnyye kvantovyye tochki [Nanoparticles, nano systems and their application. Part 1. Colloidal quantum dots], Aeterna Publishing, Ufa, 2015 (in Russian).

9. **Shi Z. J., Guo J., Chen Y. H., et al.,** Lead-free organic-inorganic hybrid perovskites for photovoltaic applications: Recent advances and perspectives, Adv. Mater. 29 (16, 3 Febr.) (2017) 1605005.

10. **Gao W., Ran C., Li J., et al.,** Robust stability of efficient lead-free formamidinium tin iodide perovskite solar cells realized by structural regulation, J. Phys. Chem. Lett. 9 (24) (2018) 6999–7006.

11. **Li H., Zhang W.,** Perovskite tandem solar cells: From fundamentals to commercial deployment, Chem. Rev. 120 (18) (2020) 9835–9950.

12. **Rong Sh.-Sh., Faheem M. B., Li Y.-B.**, Perovskite single crystals: Synthesis, properties, and applications, J. Electron. Sci. Technol. 19 (2) (2021) 100081.

13. **Lian Zh., Yan Q., Gao T., et al.,** Perovskite $CH_3NH_3PbI_3(Cl)$ single crystals: Rapid solution growth, unparalleled crystalline quality, and low trap density toward 10^8 cm^{-3}, J. Am. Chem. Soc. 138 (30) (2016) 9409–9412.

14. **Zhang Y., Zhang H., Zhang X., et al.,** Major impediment to highly efficient, stable and low-cost perovskite solar cells, Metals. 8 (11) (2018) 964.

15. **Xiao M., Huang F., Huang W., et al.,** A fast deposition-crystallization procedure for highly efficient lead iodide perovskite thin-film solar cells, Angew. Chem. Int. Edit. 53 (37) (2014) 9898–9903.

16. **Ahmed D. S., Mohammed B. K., Mohammed M. K. A.,** Long-term stable and hysteresis-free planar perovskite solar cells using green antisolvent strategy, J. Mater. Sci. 56 (27) (2021) 15205–15214.

17. **Shaikh J. S., Shaikh N. S., Sheikh A. D., et al.,** Perovskite solar cells: In pursuit of efficiency and stability, Mater. Design. 136 (15 Dec) (2017) 54–80.

18. **Li D., Shi J., Xu Y., et al.,** Inorganic-organic halide perovskites for new photovoltaic technology, Natl. Sci. Rev. 5 (4) (2018) 559–576.

19. **Zhang W., Li Y., Liu X., et al.,** Ethyl acetate green antisolvent process for high-performance planar low-temperature SnO_2-based perovskite solar cells made in ambient air, Chem. Eng. J. 379 (1 Jan) (2020) 122298.

20. **Zhang P., Gu N., Song L., et al.,** The disappearing additive: introducing volatile ethyl acetate into a perovskite precursor for fabricating high efficiency stable devices in open air, Nanoscale. 14 (13) (2020) 5204–5213.

21. **Khan R., Ighodalo K. O., Xiao Z.,** Ion migration in metal halide perovskites solar cells, soft-matter thin film solar cells: Physical processes and device simulation, AIP Publishing LLC, Melville, New York (2020) 1–283.

22. **Zhao Y.-C., Zhou W.-K., Zhou X., et al.,** Quantification of light-enhanced ionic transport in lead iodide perovskite thin films and its solar cell applications, Light Sci. Appl. 6 (5, 5 May) (2017) e16243.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ОВЕЗОВ Максат Кемалович – *младший научный сотрудник лаборатории неравновесных процессов в полупроводниках Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
strontiumx94@gmail.com
ORCID: 0009-0009-6273-1478

РЯБКО Андрей Андреевич – *кандидат технических наук, младший научный сотрудник лаборатории неравновесных процессов в полупроводниках Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
a.a.ryabko93@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9626-7612

АЛЕШИН Андрей Николаевич — *доктор физико-математических. наук, заведующий лабораторией неравновесных процессов в полупроводниках Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
aleshin.transport@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0001-5449-4446

МОШНИКОВ Вячеслав Алексеевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры микро- и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия.*
197376, Россия, г. Санкт Петербург, ул. Проф. Попова, 5
vamoshnirov@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6500-5492

КОНДРАТЬЕВ Валерий Михайлович — *аспирант Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук, г. Санкт-Петербург; младший научный сотрудник Московского физико-технического института (Национального исследовательского университета), г. Москва, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8/3
kvm_96@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3469-5897

МАКСИМОВ Александр Иванович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры микро- и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия.*
197376, Россия, г. Санкт Петербург, ул. Проф. Попова, 5
aimaximov@mail.ru
ORCID: 0000-0003-0195-8870

THE AUTHORS

OVEZOV Maksat K.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
strontiumx94@gmail.com
ORCID: 0009-0009-6273-1478

RYABKO Andrey A.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
a.a.ryabko93@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9626-7612

ALESHIN Andrey N.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
aleshin.transport@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0001-5449-4446

MOSHNIKOV Vyacheslav A.
St. Petersburg Electrotechnical University "LETI"
5 Professor Popov St., St. Petersburg, 197376, Russia
vamoshnirov@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6500-5492

KONDRATYEV Valeriy M.
Alferov University, RAS
Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
kvm_96@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3469-5897

MAXIMOV Alexander I.
St. Petersburg Electrotechnical University "LETI"
5 Professor Popov St., St. Petersburg, 197376, Russia
aimaximov@mail.ru
ORCID: 0000-0003-0195-8870

Статья поступила в редакцию 14.09.2023. Одобрена после рецензирования 20.10.2023. Принята 20.10.2023.
Received 14.09.2023. Approved after reviewing 20.10.2023. Accepted 20.10.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Научная статья
УДК 538.913
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16402

АНИЗОТРОПИЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ АТОМОВ КИСЛОРОДА КАК ВОЗМОЖНАЯ ПРИЧИНА ФОРМИРОВАНИЯ АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСТВА В ПЕРОВСКИТАХ

А. Е. Ганжа ✉, М. А. Князева, А. В. Филимонов, Р. Г. Бурковский

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ alexander.ganzha@gmail.com

Аннотация. В работе проанализированы особенности структуры перовскитоподобных материалов вида ABO_3, ответственные за формирование антисегнетоэлектрических фаз. С этой целью сопоставлено описание ряда монокристаллов с помощью трех моделей: адаптированной дипольной Слэтера (I), оболочечной Каули (II) и модели Борна – Кармана, дополненной учетом диполь-дипольных сил и параметризованной на основе первопринципных расчетов Госеза (III). Определены параметры модели I, при которых наблюдается качественное согласие с данными по неупругому рассеянию рентгеновского излучения из экспериментов с гафнатом свинца. Анализ всех результатов привел к заключению, что модель I и параметризация Госеза подтверждают гипотезу о ключевой роли латеральной компоненты поляризуемости атомов кислорода над ее аксиальной компонентой для формирования антисегнетоэлектричества. Однако результаты использования модели II этого не подтверждают.

Ключевые слова: структурный фазовый переход, антисегнетоэлектрик, оболочечная модель, диполь-дипольное взаимодействие

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Для цитирования: Ганжа А. Е., Князева М. А., Филимонов А. В., Бурковский Р. Г. Анизотропия поляризуемости атомов кислорода как возможная причина формирования антисегнетоэлектричества в перовскитах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 20–29. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16402

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16402

THE POLARIZABILITY ANISOTROPY OF OXYGEN ATOMS AS A POSSIBLE REASON FOR THE FORMATION OF ANTIFERROELECTRICITY IN PEROVSKITES

A. E. Ganzha ✉, M. A. Kniazeva, A. V. Filimonov, R. G. Burkovsky

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

✉ alexander.ganzha@gmail.com

Abstract. The paper analyzes the structural features of perovskite-like ABO_3 type materials responsible for the formation of antiferroelectric phases. For this purpose, the descriptions of some single crystals have been compared using three models: the adapted Slater dipole model

(I), the Cowley shell model (II) and the Born – Karman model supplemented with consideration of dipole-dipole forces and parameterized basing on *ab initio* calculations by Ghosez (III). The parameters of model I were found at which qualitative agreement with the data on inelastic X-ray scattering obtained by experiments with lead hafnate was observed. An analysis of all the results led to the conclusion that model I and the Ghosez parameterization confirmed the hypothesis about the key role of the lateral component of the oxygen atoms' polarizability over its axial component for the antiferroelectricity formation. However, model II data did not support this.

Keywords: structural phase transition, antiferroelectric, shell model, dipole-dipole interaction

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Ganzha A. E., Kniazeva M. A., Filimonov A. V., Burkovsky R. G., The polarizability anisotropy of oxygen atoms as a possible reason for the formation of antiferroelectricity in perovskites, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 20–29. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16402

Введение

Структурные нестабильности в перовскитах привлекают усиленное внимание, поскольку кристаллы перовскитов и тонкие пленки на их основе находят множество технических применений в электромеханических сенсорах и приводах, пироэлектрических сенсорах, электрокалорических охладителях, накопителях энергии и запоминающих устройствах [1 – 5].

Когда кристалл теряет стабильность по отношению к одной из фононных мод, происходит структурный фазовый переход. Представить этот процесс можно следующим образом. Кристалл, состоящий из N атомов, обладает $3N$ степенями свободы, связанными со смещениями этих атомов из фиксированных положений равновесия (по три степени свободы на каждый атом).

Внутреннюю энергию в гармоническом приближении можно выразить квадратичной формой вида

$$\frac{1}{2}\mathbf{u}^T \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{u},$$

где $\mathbf{u}$ – вектор смещений длиной $3N$, $\mathbf{U}$ – матрица силовых констант для вектора $\mathbf{u}$.

Некоторые собственные числа (СЧ) квадратичной формы будут обязательно равны нулю, например СЧ, которые соответствуют однородному смещению кристалла как целого. Однако остальные СЧ должны быть положительными, чтобы при внешнем возмущении кристалл стремился вернуться в состояние равновесия. Последовательно эта теория изложена в ряде работ и учебников по динамике решетки [6, 7]. Когда в перовскитоподобных кристаллах происходит структурный фазовый переход из кубической фазы в низкосимметричную фазу (которая характеризуется каким-либо искажением кристаллической решетки), СЧ, соответствующее данному искажению, становится равным нулю или отрицательному числу. Если же речь идет о сегнетоэлектрических фазовых переходах, то это СЧ должно соответствовать нулевому волновому вектору, т. е. Г-точке кубической зоны Бриллюэна. Для других переходов, например антисегнетоэлектрических, СЧ будет соответствовать другой точке зоны Бриллюэна.

Таким образом, вопрос, почему перовскиты испытывают фазовые переходы и почему все эти переходы столь различны, сводится к более конкретным вопросам, а именно – почему какое-то из собственных чисел могло бы оказаться отрицательным и почему это отрицательное СЧ соответствует именно этой, а не какой-либо другой точке зоны

Бриллюэна. Так, в рамках одного из подходов, изложенного в работе Джона Слэтера [9] для титаната бария $BaTiO_3$, предложено разделить все силы, действующие на ионы, на две группы.

К *первой группе* относятся короткодействующие силы расталкивания, которые возникают (в наиболее простой интерпретации) ввиду стремления электронных облаков ионного кристалла уменьшить степень взаимного перекрытия. Указанные силы расталкивания тяготеют к стабилизации высокосимметричной кубической фазы, иными словами – к сохранению всех собственных чисел энергетической квадратичной формы положительными.

Вторая группа сил – это диполь-дипольные, обусловленные кулоновским взаимодействием. В отличие от первой группы, диполь-дипольные силы действуют на больших расстояниях. При учете влияния таких диполей друг на друга оказывается, что в кристаллах со структурой перовскита такие диполи склонны выстраиваться в линии, проходящие вдоль цепочек O–B в структуре ABO_3. Такая тенденция к формированию цепочек со стороны диполь-дипольных сил может приводить к отрицательному значению СЧ, соответствующего этому искажению. Указанная деформация приводит к сегнетоэлектрическому свойству, поскольку в каждой из ячеек ABO_3 смещения организованы одинаково. Эта структурная перестройка формируется как следствие преобладающего влияния диполь-дипольных сил именно на центр зоны Бриллюэна [8].

Таким образом, теория Слэтера отвечает на оба поставленных вопроса для такого сегнетоэлектрика, как титанат бария $BaTiO_3$: почему и какое именно собственное число становится отрицательным.

Однако начиная с 1990-х годов, взгляды Джона Слэтера регулярно подвергаются критическому переосмыслению. Например, с развитием квантовомеханических расчетов было обнаружено, что эти кристаллы далеко не абсолютно ионные, т. е. перекрытие электронных облаков приводит не только к отталкиванию, но и к притяжению в результате гибридизации орбиталей и формирования частично ковалентных связей. Другими словами, дестабилизация кубической фазы происходит не только ввиду действия диполь-дипольных сил, но и вследствие влияния частичной ковалентности связи. Роль диполь-дипольных сил при этом сохраняется, поскольку ковалентные силы являются короткодействующими. В противном случае трудно объяснить, каким именно образом могут формироваться упорядочения структуры на дальних расстояниях, а также какой именно точке зоны Бриллюэна будут соответствовать результирующие искажения.

В недавней работе Р. Г. Бурковского [10] модель Слэтера [9] использована для описания антисегнетоэлектрических несоразмерных фаз: установлено, что диполь-дипольные силы могут усиливать не только однородную поляризацию (центр зоны Бриллюэна), но и несоразмерные искажения; однако для этого нужны более сложные характеристики короткодействующих сил, которые могли бы отменить стремление диполь-дипольных сил к повышению поляризации вдоль цепочек O–B. Это возможно, если структура кристалла такова, что даже при наличии диполь-дипольных сил сформировать диполь вдоль такой цепочки оказывается очень затратным с энергетической точки зрения. Например, необходимы немалые затраты энергии, если ионы расположены очень плотно и не могут сильно сдвигаться вдоль этих цепочек O–B, а их электронные облака также не могут вытягиваться в этом направлении. Мерой плотности упаковки атомов для перовскитоподобных кристаллов выступает фактор толерантности: при его значениях меньше единицы, атомы плотно упакованы вдоль цепочек O–B [11]. Для кристалла семейства цирконата свинца $PbZrO_3$ фактор толерантности равен 0,756, что удовлетворяет такому случаю: ионный радиус B-иона (Zr^{4+}) велик и анионы кислорода O^{2-} оказываются «зажатыми» между катионами циркония. При подавленной способности формировать дипольные цепочки O–B, высвобождаются другие возможности упорядочения диполей. Например, благодаря комбинации сильной поляризуемости атомов кислорода в плоскостях O–A (перпендикулярно цепочкам O–B) с сильной поляризуемостью иона A, энергетически выгодной может оказаться такая потеря кубической симметрии, при которой диполи образуют несоразмерную модуляционную волну, распространяющуюся в плоскости O–A.

Модель Слэтера – отнюдь не единственная, которая бы позволила объяснить, почему в перовскитах возникают несоразмерность и антисегнетоэлектричество. Стоит рассмотреть оболочечную модель, которая описывает энергию всей решетки, а не только ее дипольной подсистемы, а также модель Борна – Кармана с учетом диполь-дипольных сил, которую также использовали ранее для параметризации энергии решетки перовскитоподобных кристаллов. Эти две модели ранее не сопоставлялись, и мы предпринимаем первые шаги в этом направлении.

Цели и метод исследования

Чтобы выяснить, насколько существенно влияет комбинация поляризуемости атомов кислорода в плоскостях O–A с сильной поляризуемостью иона A на формирование экспериментально наблюдаемых несоразмерных и антисегнетоэлектрических фаз в кристаллах семейства цирконата свинца, мы сопоставляем значения поляризуемости различных групп атомов в кубической фазе гафната свинца $PbHfO_3$. С этой целью мы проанализировали экспериментальные данные по неупругому рассеянию рентгеновского излучения на монокристаллах антисегнетоэлектрика гафната свинца в рамках двух моделей: дипольной [10] и оболочечной [12, 13].

Математический аппарат, основанный на оболочечной и дипольной моделях и использованный нами для описания рассматриваемых явлений, представляется нам слишком объемным, чтобы в полной мере изложить его в этой работе, тем более что явное математическое изложение этих моделей представлено в работах Р. А. Каули [13] и Р. Г. Бурковского [10]. Имеющиеся результаты мы сравниваем со значениями поляризуемости, полученными из первопринципных (*ab initio*) квантовомеханических расчетов П. Госеза и соавторов [14].

Оболочечная модель впервые была предложена Б. Г. Диком и А. У. Оверхаузером [15] и адаптирована для перовскитов Р. А. Каули [13]. В рамках модели поляризуемость складывается из суммы ионной и электронной поляризуемостей. Первая связана со смещением всего иона из положения равновесия. Смещению иона под действием внешних сил препятствуют короткодействующие силы между оболочкой иона и оболочками его соседей. Помимо смещения иона как целого, заряженное ядро смещается внутри электронной оболочки. Этот процесс отождествляется со второй, электронной, поляризуемостью.

Дипольная модель считается упрощением оболочечной. Упрощение состоит в том, что для описания внутренней энергии в кристалле достаточно учитывать дальнодействующие силы и лишь части короткодействующих, которые описывают поляризуемость атомов кристаллической решетки [10].

В работе Ф. Госеза и соавторов, с результатами которой мы проводим сравнение поляризуемостей, проведено разложение межатомных взаимодействий на короткодействующие и дальнодействующие составляющие для нескольких перовскитоподобных кристаллов: антисегнетоэлектрика цирконата свинца $PbZrO_3$ и сегнетоэлектриков титаната бария и титаната свинца ($BaTiO_3$ и $PbTiO_3$). Мы выполнили пересчет поляризуемостей из параметров Госеза как Z^2/k, где Z – борновские эффективные заряды, а k – соответствующие силовые константы.

Далее изложены основные результаты проведенного анализа.

Экспериментальные фононные дисперсионные кривые и их описание на основе оболочечной модели представлены на рис. 1, *a* и *b* [12]. Видно, что оболочечная модель адекватно воспроизводит анизотропию фононных дисперсионных кривых для поперечных фононов.

Для описания экспериментальных данных (см. рис. 1, *a*,*b*) с помощью дипольной модели, мы пересчитали ветви акустических фононнов в дипольную жесткость α по формуле

$$\alpha = CE^2,$$

где E, Дж, – энергия фонона; C, Кл^2/(Дж^2·м^3), – размерный коэффициент.

Мы считаем такой пересчет вполне справедливым, поскольку частота поперечных акустических фононов и дипольная жесткость – симбатные величины: чем выше значение дипольной жесткости, тем большую энергию должны иметь фононы, создающие такие дипольные волны. На рис. 1,*c* представлен трехмерный график дипольной жесткости в плоскости *hk*0 зоны Бриллюэна: качественное согласие с экспериментальными

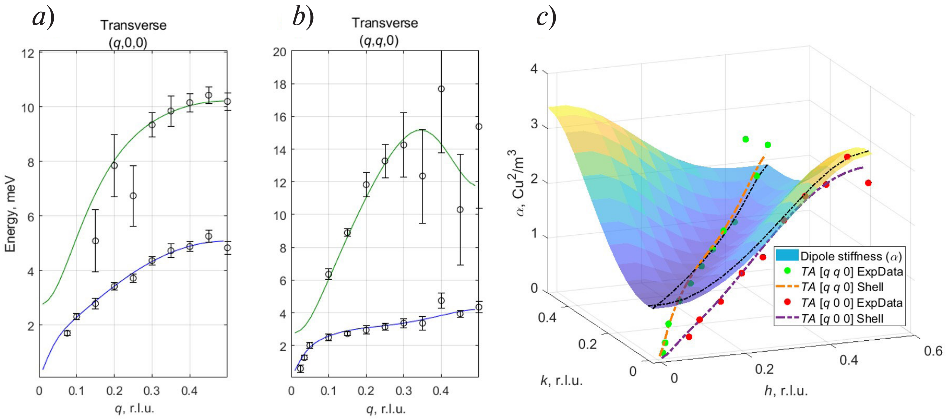


Рис. 1. Экспериментальные фононные дисперсионные кривые гафната свинца в кубической фазе (символы) и их аппроксимации оболочечной моделью (сплошные линии) для поперечных фононов, распространяющихся в направлениях [100] (*a*) и [110] (*b*), а также описание акустической фононной ветви (TA) дипольной моделью (*c*)

данными по неупругому рассеянию на монокристаллах гафната свинца достигнуто при C = 0,12 Кл²/(Дж²·м³). Для такого изображения жесткости в рамках дипольной модели поляризуемость A-иона α_A должна быть выше поляризуемости B-иона α_B; получено, что параметр анизотропии атомов кислорода $\delta = \alpha_{O\text{-}A}/\alpha_{O\text{-}B}$ в этом случае равен 1,40.

Анализ результатов, представленных на рис. 1, позволяет заключить, что обе модели адекватно воспроизводят анизотропию фононных дисперсионных кривых вдоль различных направлений, а значит можно ожидать определенного совпадения при использовании дипольной и оболочечной моделей.

В таблице представлены значения поляризуемости атомов, полученные с использованием трех моделей, а также аналогичные данные для титаната бария $BaTiO_3$, полученные А. В. Туриком и А. Г. Хасабовым [16] с помощью оболочечной модели и модели Слэтера [9].

Значения поляризуемостей α_A и α_B A- и B-катионов в гафнате свинца оказались, по нашим оценкам, очень схожими при использовании дипольной и оболочечной моделей (их строгое равенство в таблице – случайное), однако поляризуемости анионов кислорода – различными. Более того, в рамках описаний по двум моделям получены различные прогнозы для отношения поляризуемостей атомов кислорода вдоль различных направлений: для оболочечной модели параметр анизотропии $\delta = \alpha_{O\text{-}A}/\alpha_{O\text{-}B} = 0{,}75$, тогда как для дипольной модели $\delta = 1{,}40$.

Это неожиданный результат, который можно объяснить упрощением оболочечной модели, а именно тем, что дипольная модель не учитывает всех особенностей, связанных с воздействием короткодействующих сил на атомы. Однако проблема требует расширенного исследования, и на данном этапе нельзя сделать однозначный выбор в пользу какой-либо модели.

Согласно *ab initio* расчетам Госеза, значение параметра анизотропии атомов кислорода δ превышает единицу только для антисегнетоэлектрика $PbZrO_3$, в то время как для сегнетоэлектриков $BaTiO_3$ и $PbTiO_3$ этот параметр менее единицы. Это позволяет предположить, что анизотропия поляризуемости кислорода, при которой подавлено формирование диполей вдоль цепочек O–B и усилено в плоскостях O–A, выступает действительно важным фактором в формировании антисегнетоэлектричества.

Стоит отметить большое численное различие между поляризуемостями, полученными из первопринципных (*ab initio*) расчетов Госеза, и таковыми по предсказаниям моделей. На наш взгляд, причиной различия может быть нестабильность кристалла, которую предполагает модель Госеза (в отличие от допущений дипольной и оболочечной моделей), а значит, поляризуемости по этой модели могут оказаться выше. Кроме того, при расчетах поляризуемостей по модели Госеза мы использовали борновские заряды; однако при

Таблица

Сравнение значений поляризуемости, полученных по разным расчетным моделям для кислородного аниона в двух позициях кристаллических решеток и для различных катионов

ABO_3	Модель	Поляризуемость, Å^3			
		α_A	α_B	$\alpha_{O\text{-}A}$	$\alpha_{O\text{-}B}$
$PbHfO_3$	Оболочечная [12, 13]	4,90	0,37	2,74	3,63
	Дипольная [10]			3,90	2,78
$PbZrO_3$	*Ab initio* расчеты Госеза [14]	177,43	22,33	55,80	12,48
$PbTiO_3$		89,86	52,73	21,70	32,39
$BaTiO_3$		10,07	52,17	9,97	38,86
	Оболочечная [16]	1,95	0,18	0,64	3,80
	Слэтера [9]	1,94	0,19	2,38	

Обозначения: α_A, α_B – поляризуемости катионов A^2+ и B^{4+}; $\alpha_{O\text{-}A}$, $\alpha_{O\text{-}B}$ – поляризуемости аниона O^{2-} в плоскостях O–A и вдоль цепочек O–B.

Примечание. Для оболочечной модели представлены значения электронной поляризуемости, для остальных моделей – полной поляризуемости.

вычислениях локальных свойств кристалла, к которым относится и поляризуемость отдельных атомов, на применение таких зарядов иногда накладываются ограничения.

Обсуждение

В данной работе мы проанализировали особенности структурной организации перовскитоподобных материалов с тем, чтобы выделить ее специфические свойства, приводящие к формированию антисегнетоэлектрических состояний при структурных фазовых переходах.

С этой целью мы описали наблюдаемый на эксперименте фононный спектр гафната свинца $PbHfO_3$ двумя моделями: оболочечной [12] и дипольной [10]. Эти модели в принципе обладают сходством: внутренняя энергия кристаллической структуры складывается из двух сил различного характера, оказывающих влияние на ионы, – короткодействующих и дальнодействующих. Первые возникают вследствие перекрытия электронных облаков соседних ионов и включают как силы расталкивания, направленные на поддержание высокосимметричной фазы в кристалле, так и силы притяжения, вызванные гибридизацией электронных орбиталей и формированием частично ковалентных связей. Вторые, дальнодействующие силы, будучи кулоновскими по своей природе, определяют внутреннюю организацию кристалла на удаленных расстояниях, ввиду упорядочения диполей в кристалле. Дипольная модель является некоторой рационализацией оболочечной и удобна для представления несоразмерных фаз в антисегнетоэлектриках. Упрощение состоит в ограниченном описании внутренней энергии в кристалле, включающем учет лишь части короткодействующих сил, влияющих на поляризуемость атомов кристаллической решетки (учет дальнодействующих сил сохраняется).

Обе модели, как правило, адекватно воспроизводят экспериментальные данные, описания находятся в соответствии в отношении значений величин поляризуемостей A- и B-катионов, однако дают разные оценки поляризуемости анионов кислорода: согласно оболочечной модели, поляризуемость $\alpha_{O\text{-}A}$ атомов кислорода вдоль плоскостей O–A меньше таковой для атомов кислорода вдоль цепочек O–B; в рамках же дипольной модели результаты оказываются прямо противоположными.

Сопоставление полученных параметров с результатами *ab initio* расчетов Госеза и соавторов [14] для сегнетоэлектрических и антисегнетоэлектрических перовскитов подтверждает гипотезу о ключевой роли особого характера анизотропии поляризуемости атомов кислорода для реализации в кристалле структурного фазового перехода в антисегнетоэлектрическую, или несоразмерную фазу. Согласно результатам, полученным *ab initio* расчетами, как и по дипольной модели, для перехода кристалла в антисегнетоэлектрическую фазу необходимо, чтобы значение $\alpha_{\text{O-A}}$ превышало значение $\alpha_{\text{O-B}}$. В то же время количественного согласия между параметрами не наблюдается: значения параметров по Госезу многократно превышают таковые для диполь-дипольной модели. Мы связываем это расхождение с тем, что при вычислении локальных поляризуемостей по модели Госеза мы использовали борновские заряды, которые, строго говоря, определены для смещений целых подрешеток, а не отдельных ионов, т. е. поляризуемость, вычисленная с использованием борновских зарядов, может оказаться существенно завышенной.

Заключение

Каждое из полученных нами модельных описаний обладает некоторыми преимуществами перед остальными. Ценность описания дипольной моделью состоит в том, что в формировании экспериментального трехмерного распределения дипольной жесткости понятна роль каждого из параметров. Преимущество описания по оболочечной модели заключается в возможности прямого сопоставления расчетных результатов с экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновского излучения. Описание же моделью Борна – Кармана, учитывающей диполь-дипольные силы, позволяет связать экспериментальные данные с расчетными по методу расчета электронной структуры систем многих частиц (на основе теории функционала плотности, *англ.* Density Functional Theory (DFT)), т. е. с DFT-вычислениями.

Причины несоразмерности и антисегнетоэлектричества в перовскитах еще не до конца понятны; предпринимаются различные попытки их объяснить, начиная от макроскопических моделей и заканчивая атомистическими моделями различной детализации [10, 17 – 21]. В настоящей статье мы ограничились тремя моделями, для которых можно выявить роль соотношения поляризуемостей различных атомов в изучаемом явлении. Со стороны этой специфики есть сходство предсказаний двух моделей, но они противоречат предсказанию третьей. Пока представляется преждевременным сделать однозначный выбор в пользу какой-либо из моделей, поскольку каждая из них имеет свои преимущества и можно привести вполне разумные аргументы в их защиту.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Haertling G. H.** Ferroelectric ceramics: history and technology // Journal of the American Ceramic Society. 1999. Vol. 82. No. 4. Pp. 797–818.

2. **Scott J. F.** Applications of modern ferroelectrics // Science. 2007. Vol. 315. No. 5814. Pp. 954–959.

3. **Wei X.-K., Tagantsev A. K., Kvasov A., Roleder K., Jia C.-L., Setter N.** Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials // Nature Communications. 2014. Vol. 5. 08 January. P. 3031.

4. **Geng W., Liu Y., Meng X., Bellaiche L., Scott J. F., Dkhil B., Jiang A.** Giant negative electrocaloric effect in antiferroelectric La-doped $Pb(ZrTi)O_3$ thin films near room temperature // Advanced Materials. 2015. Vol. 27. No. 20. Pp. 3165–3169.

5. **Xu B., Hciguez J., Bellaiche L.** Designing lead-free antiferroelectrics for energy storage // Nature Communications. 2017. Vol. 8. 30 May. P. 15682.

6. **Борн М., Кунь Х.** Динамическая теория кристаллических решеток. Пер. с англ. М.: Изд-во иностранной литературы, 1958. 487 с.

7. **Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж.** Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. Пер. с англ. М.: Мир, 1965. 384 с.

8. **Андерсон П. В.** Качественное рассмотрение статистических фазовых переходов в сегнетоэлектриках типа $BaTiO_3$ // Физика диэлектриков (Сборник статей) Ред. Г. И. Сканави. М.: Изд. АН СССР, 1960. С. 290–301.

9. **Slater J. C.** The Lorentz correction in barium titanate // Physical Review. 1950. Vol. 78. No. 6. Pp. 748–760.

10. **Burkovsky R.** Dipole-dipole interactions and incommensurate order in perovskite structures // Physical Review B. 2018. Vol. 97. No. 18. P. 184109.

11. **Sato T., Takagi S., Deledda S., Hauback B. C., Orimo S. I.** Extending the applicability of the Goldschmidt tolerance factor to arbitrary ionic compounds // Scientific Reports. 2016. Vol. 6. No. 1. P. 23592.

12. **Burkovsky R., Andronikova D., Bronwald Yu., Filimonov A., Vakhrushev S.** An analysis of the phonon dispersion curves of lead hafnate in the cubic phase using lattice-dynamical models // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2016. No. 3 (248). Pp. 9–14.

13. **Cowley R. A.** Lattice dynamics and phase transitions of strontium titanate // Physical Review A. 1964. Vol. 134. No. 4A. Pp. A981–A997.

14. **Ghosez Ph., Cockayne E., Waghmare U. V., Rabe K. M.** Lattice dynamics of $BaTiO_3$, $PbTiO_3$, and $PbZrO_3$: A comparative first-principles study // Physical Review B. 1999. Vol. 60. No. 2. Pp. 836–843.

15. **Dick Jr. B. G., Overhauser A. W.** Theory of the dielectric constants of alkali halide crystals // Physical Review. 1958. Vol. 112. No. 1. Pp. 90–102.

16. **Turik A. V., Khasabov A. G.** Shell model and single-particle ion potentials in $BaTiO_3$ crystal // Ferroelectrics. 1988. Vol. 83. No. 1. Pp. 165–169.

17. **Hlinka J., Márton P.** Phenomenological model of a 90° domain wall in $BaTiO_3$-type ferroelectrics // Physical Review B. 2006. Vol. 74. No. 10. P. 104104.

18. **Tagantsev A. K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S. B., et al.** The origin of antiferroelectricity in $PbZrO_3$ // Nature Communications. 2013. Vol. 4. 29 July. P. 2229.

19. **Patel K., Prosandeev S., Yang Y., Xu B., Hciguez J., Bellaiche L.** Atomistic mechanism leading to complex antiferroelectric and incommensurate perovskites // Physical Review B. 2016. Vol. 94. No. 5. P. 054107.

20. **Xu B., Hellman O., Bellaiche L.** Order-disorder transition in the prototypical antiferroelectric $PbZrO_3$ // Physical Review B. 2019. Vol. 100. No. 2. P. 020102.

21. **Bussmann A., Bilz H., Roenspiess R., Schwarz K.** Oxygen polarizability in ferroelectric phase transitions // Ferroelectrics. 1980. Vol. 25. No. 1. Pp. 343–346.

REFERENCES

1. **Haertling G. H.,** Ferroelectric ceramics: history and technology, J. Am. Ceram. Soc. 82 (4) (1999) 797–818.

2. **Scott J. F.,** Applications of modern ferroelectrics, Science. 315 (5814) (2007) 954–959.

3. **Wei X.-K., Tagantsev A. K., Kvasov A., et al.,** Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials, Nat. Commun. 5 (08 Jan) (2014) 3031.

4. **Geng W., Liu Y., Meng X., et al.,** Giant negative electrocaloric effect in antiferroelectric La-doped $Pb(ZrTi)O_3$ thin films near room temperature, Adv. Mater. 27 (20) (2015) 3165–3169.

5. **Xu B., Hciguez J., Bellaiche L.,** Designing lead-free antiferroelectrics for energy storage, Nat. Commun. 8 (30 May) (2017) 15682.

6. **Born M., Huang Kun,** Dynamical theory of crystal lattices, Clarendon Press, Oxford, UK, 1988.

7. **Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. H.,** Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation, Academic Press, New York, London, 1963.

8. **Anderson P. W.,** Qualitative considerations on the statistics of the phase transition of $BaTiO_3$ type ferroelectrics, In book: A career in theoretical physics, Second Ed., Pp. 61– 69 ("World Scientific Series in 20th Century Physics", Vol. 35), World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, USA, 2005.

9. **Slater J. C.,** The Lorentz correction in barium titanate, Phys. Rev. 78 (6) (1950) 748–760.

10. **Burkovsky R.,** Dipole-dipole interactions and incommensurate order in perovskite structures, Phys. Rev. B. 97 (18) (2018) 184109.

11. **Sato T., Takagi S., Deledda S., et al.,** Extending the applicability of the Goldschmidt tolerance factor to arbitrary ionic compounds, Sci. Rep. 6 (1) (2016) 23592.

12. **Burkovsky R., Andronikova D., Bronwald Yu., et al.,** An analysis of the phonon dispersion curves of lead hafnate in the cubic phase using lattice-dynamical models, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (248)) (2016) 9–14.

13. **Cowley R. A.,** Lattice dynamics and phase transitions of strontium titanate, Phys. Rev. 134 (4A) (1964) A981–A997.

14. **Ghosez Ph., Cockayne E., Waghmare U. V., Rabe K. M.,** Lattice dynamics of $BaTiO_3$, $PbTiO_3$, and $PbZrO_3$: A comparative first-principles study, Phys. Rev. B. 60 (2) (1999) 836–843.

15. **Dick Jr. B. G., Overhauser A. W.,** Theory of the dielectric constants of alkali halide crystals, Phys. Rev. 112 (1) (1958) 90–102.

16. **Turik A. V., Khasabov A. G.,** Shell model and single-particle ion potentials in $BaTiO_3$ crystal, Ferroelectr. 83 (1) (1988) 165–169.

17. **Hlinka J., Márton P.,** Phenomenological model of a 90° domain wall in $BaTiO_3$-type ferroelectrics, Phys. Rev. B. 74 (10) (2006) 104104.

18. **Tagantsev A. K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S. B., et al.,** The origin of antiferroelectricity in $PbZrO_3$, Nat. Commun. 4 (29 July) (2013) 2229.

19. **Patel K., Prosandeev S., Yang Y., et al.,** Atomistic mechanism leading to complex antiferroelectric and incommensurate perovskites. Phys. Rev. B. 94 (5) (2016) 054107.

20. **Xu B., Hellman O., Bellaiche L.,** Order-disorder transition in the prototypical antiferroelectric $PbZrO_3$, Phys. Rev. B. 100 (2) (2019) 020102.

21. **Bussmann A., Bilz H., Roenspiess R., Schwarz K.,** Oxygen polarizability in ferroelectric phase transitions, Ferroelectr. 25 (1) (1980) 343 –346.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГАНЖА Александр Евгеньевич – *аспирант, младший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexander.ganzha@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9974-1073

КНЯЗЕВА Мария Александровна – *инженер и младший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kniazeva.maria225@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1120-2102

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, а также соруководитель Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных 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

БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич – *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
roman.burkovsky@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0474-3242

THE AUTHORS

GANZHA Alexander E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexander.ganzha@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9974-1073

KNIAZEVA Maria A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kniazeva.maria225@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1120-2102

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

BURKOVSKY Roman G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
roman.burkovsky@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0474-3242

Статья поступила в редакцию 07.09.2023. Одобрена после рецензирования 08.11.2023. Принята 12.11.2023.
Received 07.09.2023. Approved after reviewing 08.11.2023. Accepted 12.11.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Научная статья
УДК 621.315.592
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16403

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ СОЕДИНИТЕЛЬНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ GaAs/AlGaAs

Е. В. Контрош ✉, В. С. Калиновский, Г. В. Климко, Б. Я. Бер,
К. К. Прудченко, И. А. Толкачев, Д. Ю. Казанцев
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
✉ kontrosh@mail.ioffe.ru

Аннотация. В температурном диапазоне 100 – 400 K исследованы вольтамперные характеристики двух типов структур соединительных туннельных диодов (ТД) n^{++}-GaAs-(δSi)/i-(GaAs/Al$_{0,2}$Ga$_{0,8}$As)/p^{++}-Al$_{0,2}$Ga$_{0,8}$As-(δBe), отличающихся температурой роста и толщинами эпитаксиальных слоев. Определены температурные зависимости основных параметров ТД: пикового значения плотности туннельного тока J_p, плотности тока долины J_v и дифференциального сопротивления R_d. Образцы ТД структуры A, выращенной при температуре 500 °C, обеспечивают в диапазоне 100 – 400 K наибольшие значения пикового тока $J_p \leq 220$ А/см^2 при температурной стабильности величины около 93 %. ТД структуры B, выращенные при температуре 450 °C, показали меньшие значения плотности пикового туннельного тока: $J_p \leq 150$ А/см^2, с существенной линейной температурной зависимостью. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и создании монолитных многопереходных фотопреобразователей мощного лазерного излучения.

Ключевые слова: вольтамперная характеристика, туннельный диод, эпитаксиальный слой, дифференциальное сопротивление, пиковый туннельный ток

Для цитирования: Контрош Е. В., Калиновский В. С., Климко Г. В., Бер Б. Я., Прудченко К. К., Толкачев И. А., Казанцев Д. Ю. Температурная характеризация соединительных туннельных диодов GaAs/AlGaAs // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 30–41. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16403

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16403

TEMPERATURE CHARACTERIZATION OF GaAs/AlGaAs CONNECTING TUNNEL DIODES

E. V. Kontrosh ✉, V. S. Kalinovskii, G. V. Klimko, B. Ya. Ber,
K. K. Prudchenko, I. A. Tolkachev, D. Yu. Kazantsev
Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia
✉ kontrosh@mail.ioffe.ru

Abstract. The current-voltage characteristics of two types of GaAs-(δSi)/i-(GaAs/Al$_{0.2}$Ga$_{0.8}$As)/p^{++}-Al$_{0.2}$Ga$_{0.8}$As-(δBe) tunnel diode (TD) structures grown at different temperatures and epitaxial layer thicknesses have been investigated in the temperature range 100–400 K. Temperature dependences of the main TD parameters were determined: the peak value of the tunnel current density (J_p), the valley current density (J_v) and the differential resistance

(R_d). TD samples of structure A grown at 500 °C exhibited the highest values of the peak current density ($J_p \leq 220$ A/cm^2) with temperature stability of 93 % over the whole temperature range. TD samples of structure B grown at 450 °C showed lower values of the peak tunneling current density ($J_p \leq 150$ A/cm^2), with significantly linear temperature dependence. Our findings can be used in the design and development of monolithic multijunction photoconverters of powerful laser radiation.

Keywords: current-voltage characteristics, tunnel diode, epitaxial layer, differential resistance, peak tunneling current

For citation: Kontrosh E. V., Kalinovskii V. S., Klimko G. V., Ber B. Ya., Prudchenko K. K., Tolkachev I. A., Kazantsev D. Yu., Temperature characterization of GaAs/AlGaAs connecting tunnel diodes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 30–41. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16403

Введение

Мощные монолитные многопереходные фотопреобразователи (МП ФЭП) монохроматического оптического излучения перспективны для создания различных систем оптоэлектроники, работающих как на Земле, так и в космосе. К таким системам можно отнести радиофотонную фазированную антенную решетку [1], энергоавтономные приемопередающие станции атмосферных оптических линий связи [2], элементы питания автономных оптоэлектронных устройств и др. [3, 4]. В зависимости от мощности оптического излучения и области применения, МП ФЭП могут работать в широком диапазоне температур (100 – 400 K) [5, 6]. Монолитные МП ФЭП включают в себя несколько последовательно включенных фотоактивных p–n-переходов – субэлементов на основе полупроводника с одинаковой шириной запрещенной зоны, но с различной геометрией и уровнями легирования слоев. Соединение субэлементов в МП ФЭП осуществляется встречновключенными туннельными диодами (ТД). Эффективность и надежность МП ФЭП существенно зависит от температурной стабильности параметров соединительных ТД: пикового значения плотности туннельного тока J_p, дифференциального сопротивления R_d туннельной ветви и высокой оптической прозрачности в широком диапазоне рабочих температур. Характерной особенностью соединительных ТД является высокая степень вырождения субнаноразмерных слоев, достигаемая методом дельта-легирования. Однако в процессе эпитаксиального роста всей структуры МП ФЭП, в вырожденных слоях ТД происходит взаимодиффузия донорной и акцепторной примесей, которая ведет к размытию профилей и снижению концентрации свободных носителей заряда. Эти факторы оказывают весомое влияние на параметры ТД и характер их температурной зависимости.

В данной работе экспериментально исследованы вольтамперные характеристики (ВАХ) соединительных туннельных диодов GaAs/AlGaAs в температурном диапазоне от 100 до 400 K, определены температурные зависимости параметров J_p и R_d и проведен анализ полученных результатов.

Экспериментальная часть

В работе исследовались соединительные p^{++}–i–n^{++} ТД двух типов структур: A и B, которые были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Распределения концентраций атомов в исследованных структурах, определенные методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС), представлены на рис. 1. Между вырожденными областями обеих структур ТД формировались «квазинейтральные» i-области, состоящие из двух слоев различной толщины: i-GaAs и i-Al$_{0,2}$Ga$_{0,8}$As. Обе структуры ТД были выращены на подложках GaAs (100) p-типа с концентрацией бериллия $N_A = 1 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$. После выращивания буферных слоев значения температуры эпитаксии снижали до 500 и до 450 °C для структур A и B соответственно.

Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В обеих исследованных структурах ТД наблюдалась значительная диффузия легирующей примеси бериллия в вырожденную область n^{++}-GaAs, легированную кремнием (см. рис. 1).

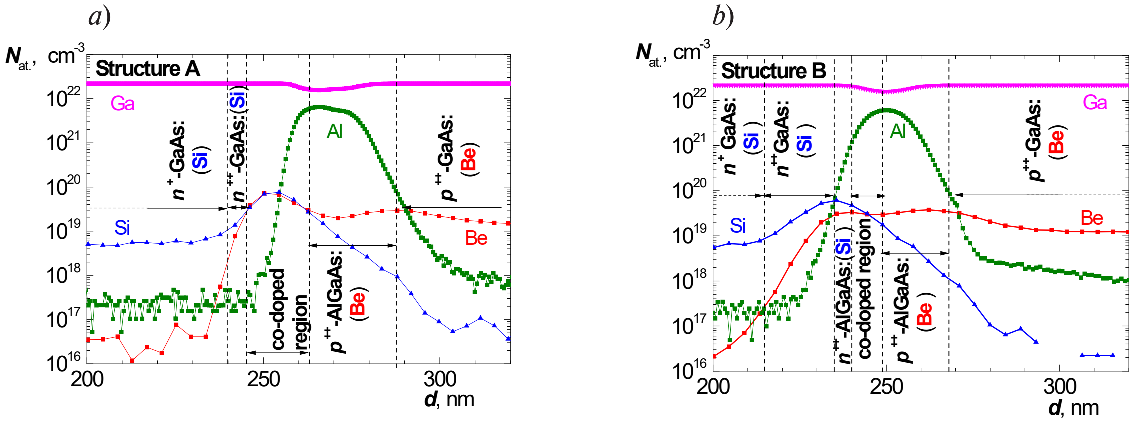


Рис. 1. Распределения концентрации N_{at} легирующих примесей по толщине образца d в структурах ТД двух типов: А (*a*) и В (*b*), определенных методом вторичной ионной масс-спектрометрии. Кривые, относящиеся к разным элементам, показаны разными цветами

Анализ данных на рис. 1 позволяет заключить, что диффузия бериллия в структуре А способствовала уменьшению толщины слоя n^{++}-GaAs и концентрации в нем свободных носителей заряда, ввиду перекомпенсации донорной и акцепторной примесей. Толщина указанного слоя, не скомпенсированного примесью бериллия, составляла примерно 5 нм при изменении концентрации атомов кремния от $1\cdot10^{19}$ до $3\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ в структуре А, и примерно 20 нм при изменении концентрации от $9\cdot10^{18}$ до $6\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ в структуре В. Диффузия атомов бериллия привела к формированию скомпенсированных квазинейтральных областей между вырожденными n^{++}- и p^{++}-слоями. На рис. 1,*a* и *b* эти области названы “co-doped region”. У структуры А данная область имеет несколько большую толщину (около 25 нм) и состоит из двух слоев – GaAs:(Si, Be) и AlGaAs:(Si, Be) (см. рис. 1,*a*). У структуры В данная область состоит только из одного слоя AlGaAs:(Si, Be), имеющего толщину, не превышающую 10 нм (см. рис. 1,*b*).

В структуре А измеренные пиковые значения концентрации атомов кремния и бериллия в области перекрытия примерно совпадают и составляют не более $8\cdot10^{19}$ см$^{-3}$. Другая ситуация складывается в структуре В, где в области перекрытия AlGaAs концентрация атомов кремния преобладает над концентрацией атомов бериллия, при этом $N_D = 5\cdot10^{19}$ см$^{-3}$, $N_A = 2\cdot10^{19}$ см$^{-3}$.

С помощью постростовой технологии, на выращенных структурах ТД были сформированы массивы диодов с диаметром мезы 225 мкм, снабженные многослойными омическими контактами с *n*- и *p*- областями AuGe-Ni-Au и AgMn-Ni-Au, возожженными в атмосфере водорода при температуре 500 °C.

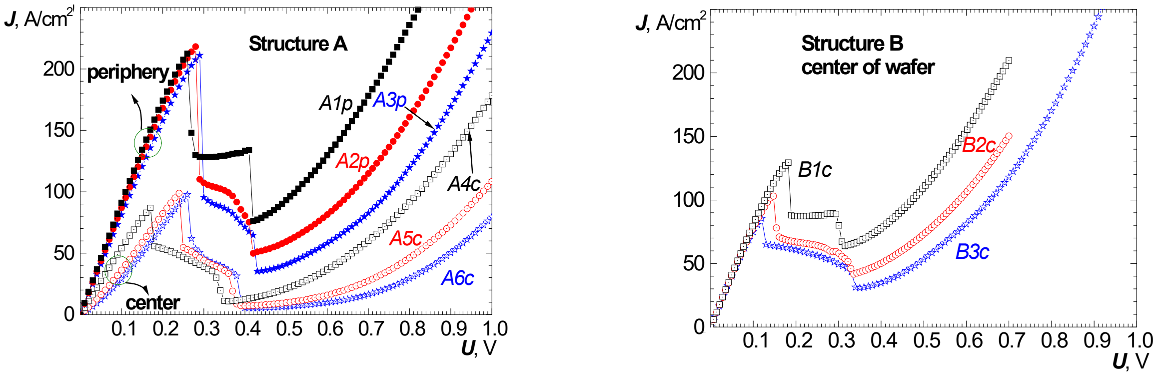
Измерения ВАХ образцов ТД структур А и В выполнялись при напряжениях прямого смещения до 1 В.

Результаты и их обсуждение

Структура А, в отличие от структуры В, при температуре 300 K проявляла разброс значений J_p от 90 до 220 А/см^2 по эпитаксиальной пластине диаметром около 6 см. В центре этой пластины значения J_p были близки к среднему значению – 116 А/см^2, а к ее периферии плотность туннельного тока J_p возрастала примерно до 220 А/см^2. Существенно меньший разброс значений, а именно J_p = 125 – 150 А/см^2, был получен для образцов в центре и на периферии эпитаксиальной пластины структуры В.

Для исследования параметров J_p и R_d в температурном диапазоне 100 – 400 K были отобраны образцы ТД из центральных и периферийных частей эпитаксиальных пластин обеих структур. ВАХ отобранных образцов, измеренные в указанном диапазоне, представлены на рис. 2.

Согласно полученным экспериментальным ВАХ, для любых образцов структуры В и периферийных структуры А наблюдаются линейные зависимости большей части туннельного участка ВАХ при понижении температуры до 100 К (см. рис. 2). В то же время для образцов из центра структуры А проявляется экспоненциальная зависимость на туннельном участке ВАХ при понижении температуры. Такое поведение зависимостей может быть обусловлено влиянием сразу нескольких факторов.



a) *b*)

Рис. 2. Результаты измерений прямых ВАХ образцов ТД двух типов структур:
А (*a*) и В (*b*) при разных температурах. Образцы взяты на периферии (кривые *A1p* – *A3p*) и в центрах (*A4c* – *A6c*, *B1c* – *B3c*) эпитаксиальных пластин; *T*, К: 353 (*A1p*, *A4c*, *B1c*), 223 (*A2p*, *A5c*, *B2c*) и 123 (*A3p*, *A6c*, *B3c*)

Как показано в работе [7], туннельный ток в ТД определяется двумя механизмами транспорта: межзонного квантового туннелирования и туннельно-ловушечным. Оба дают вклад в величину пиковой плотности туннельного тока. Согласно первому, электроны туннелируют из занятых состояний зоны проводимости на свободные состояния в валентной зоне через потенциальный барьер. Второй, туннельно-ловушечный механизм транспорта, обусловлен наличием локализованных примесных состояний (ловушек) в запрещенной зоне полупроводника. В этом случае электрон в процессе туннелирования захватывается ловушкой и далее туннелирует в разрешенные состояния валентной зоны. Понижение температуры способствует активному вымораживанию носителей заряда на ловушках, и тогда для преодоления локализованных примесных состояний необходимо увеличение электрического поля, что приводит к экспоненциальной зависимости тока от напряжения [8].

Согласно измерениям ВИМС для структуры А (см. рис. 1,*a*), данный механизм транспорта может являться доминирующим ввиду высокой степени перекрытия донорных и акцепторных примесей в центральной области p^{++}– n^{++} туннельного перехода.

Из экспериментальных ВАХ и выражения (1) [9] нами рассчитывался нормированный температурный коэффициент пикового значения плотности туннельного тока:

$$\Delta J_p = \frac{J_p^{T_j} - J_p^{T_{RT}}}{J_p^{T_{RT}}} \cdot 100\ \%, \qquad (1)$$

где ΔJ_p – температурный коэффициент; $J_p^{T_j}$, $J_p^{T_{RT}}$ – плотности пикового туннельного тока при фиксированной T_j и комнатной (T_{RT} = 300 K) температурах, соответственно.

Положительная величина ΔJ_p характеризует рост, а отрицательная – падение параметра J_p относительно его значения при комнатной температуре.

Зависимости J_p и ΔJ_p для структур А и В представлены на рис. 3,*a*, *c*. Образцы ТД из центральной (кривые *Ac*) и периферийной (кривые *Ap*) частей структуры А демонстрируют более высокую термостабильность пикового значения плотности туннельного тока, по сравнению с образцами из структуры В (кривые *Bc*). Для образцов ТД структуры А из центра и периферии пластины, изменение максимального значения J_p составляют соответственно 17 % (кривая *Ac* на рис. 3,*a*) и 7 % (кривая *Ap* там же). Для образцов ТД структуры В изменение максимального значения J_p составило 42 % (кривая *Bc* на рис. 3,*a*).

При нагреве от 300 до 400 К для образцов ТД, взятых из центра и периферии эпитаксиальной пластины структуры А, параметр J_p снижается, и значение ΔJ_p в центре пластины составило −9,5 %, а на периферии −6,8 %, (кривые *Ac* и *Ap* на рис. 3,*c*).

При понижении температуры от 300 до 100 К у образцов из центра пластины А наблюдался нелинейный рост параметра J_p с температурным коэффициентом $\Delta J_p = 7{,}5$ %, в то время как у периферийных образцов параметр J_p снижался с коэффициентом $\Delta J_p = -4{,}0$ %.

Отметим, что для образцов структуры А на рис. 3,*a* наблюдаются плавные максимумы значений пикового туннельного тока, соответственно в температурных областях 150 – 250 К (кривая *Ac*) и 200 – 300 К (кривая *Ap*). Для образцов структуры В зависимость J_p демонстрирует линейный рост во всем температурном диапазоне (кривая *Bc* на рис. 3,*a*). При нагреве от 300 до 400 К значение ΔJ_p составило 14 %, а при охлаждении примерно до 100 К оно составило −29 %.

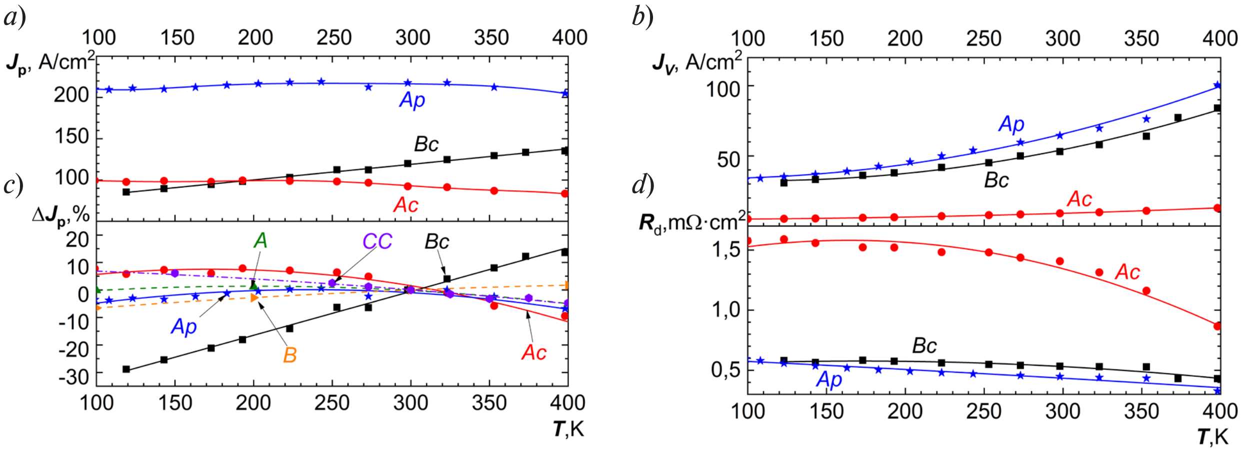


Рис. 3. Экспериментальные (кривые *Ac*, *Ap*, *Bc*) и расчетные (*A*, *B*) температурные зависимости ключевых параметров образцов ТД структур типов А и В: J_p (*a*), ΔJ_p (*c*), J_v (*b*), R_d (*d*). Образцы были взяты из центра (*Ac*, *Bc*) либо из периферии (*Ap*) эпитаксиальных пластин структур А и В.

Для сравнения приведена расчетная кривая (CC) из статьи [17] для двухбарьерного резонансного туннельного диода AlGaAs/GaAs

Поведение температурной зависимости J_p образцов ТД исследуемых структур А и В обусловлено несколькими факторами, действующими на величину J_p в противоположных направлениях [6, 9]. Во-первых, с увеличением температуры уменьшается ширина запрещенной зоны E_g полупроводника, что ведет к снижению высоты потенциального барьера и росту вероятности квантового туннелирования и величины J_p. Во-вторых, увеличение температуры снижает степень вырождения энергетических уровней вследствие перераспределения по ним электронов. Количество электронов в зоне проводимости на уровнях ниже уровня Ферми E_F в *n*-области E_c уменьшается, так как часть свободных электронов переходит на более высокие энергетические уровни, а уровень Ферми смещается вниз. В результате уменьшается количество электронов, способных к туннелированию, и величина J_p снижается.

Согласно результатам ВИМС-профилирования (см. рис. 1), уровень легирования акцепторной примеси бериллия в вырожденной области p^{++}-AlGaAs для обеих структур ТД примерно одинаков и составляет не менее $2 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$; в этом случае основное влияние на температурные характеристики ТД оказывает область n^{++}-GaAs. При уменьшении уровня концентрации свободных носителей заряда (ниже $1 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$) в области n^{++}-GaAs, основное влияние на туннельный ток J_p с ростом температуры начинает оказывать изменение положения уровня Ферми. Последний смещается ближе к дну зоны проводимости, и величина J_p падает. При более высоком уровне концентрации свободных носителей заряда (выше $1 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$) основное влияние на значение J_p в диапазоне 100 – 400 К оказывает изменение ширины запрещенной зоны, а изменение положения уровня Ферми влияет незначительно; в итоге значение J_p растет по мере увеличения температуры.

По модели, изложенной в работе [10], нами был выполнен расчет температурных зависимостей ΔJ_p ТД, аналогичных структурам А и В (см. рис. 1). Полученный результат показал качественное совпадение характера рассчитанных зависимостей ΔJ_p (сравните кривые *A* и *B* на рис. 3,*c*) с экспериментальными (кривые *Ac*, *Ap*, *Bc* на рис. 3,*c*).

Факт наличия отрицательного температурного коэффициента в диапазоне 300 – 400 К для исследованных образцов ТД структуры А, в отличие от ТД структуры В, указывает, что уровень концентрации свободных носителей заряда области n^{++}-GaAs в центре и на периферии структуры А значительно ниже, чем в структуре В, ввиду большей толщины области взаимного перекрытия и компенсации примесей кремния и бериллия (см. рис.1,*a* и 2,*a*). При этом, поскольку при температуре 400 К температурный коэффициент структуры А из центра пластины по абсолютной величине больше для образцов ТД ($\Delta J_p = -9{,}5$ %), чем у образцов ТД из периферии ($\Delta J_p = -6{,}8$ %), уровень концентрации свободных носителей заряда области n^{++}-GaAs периферийных образцов несколько выше, чем в центре пластины у структуры А, но ниже чем у структуры В. Это связано с тем, что для ТД структуры В величина J_p растет при нагреве с температурным коэффициентом $\Delta J_p = 13{,}6$ %. Разница в параметрах между периферийными и центральными образцами ТД на пластине структуры А может быть вызвана градиентом температуры по пластине еще в процессе роста структуры (на периферии температура на несколько градусов ниже, чем в центре). Это приводит к снижению степени перекомпенсации на периферии.

Величина J_p исследуемых ТД определяется уровнем легирования и величиной вырождения слоя n^{++}-GaAs ТД. Однако значение J_p периферийных образцов ТД структуры А составляет примерно 220 А/см^2, в то время как для ТД структуры В соответствующее максимальное значение составляет около 150 А/см^2. Согласно нашим предположениям, это может быть связано как с толщиной «квазинейтральной» перекомпенсированной области кремний–бериллий [10], так и с наличием в ней более высокой концентрации дефектов, обусловленных перекомпенсацией атомов примеси [11 – 16]. Это подтверждается и значениями плотности токов долины на темновых ВАХ образцов исследованных структур (см. рис. 2 и 3,*b*). С увеличением прямого напряжения смещения (см. рис. 2) плотность тока сначала возрастает до значения J_p при напряжении U_p, а затем снижается до минимального значения плотности тока долины J_v при напряжении U_v вследствие уменьшения степени перекрытия зоны проводимости с валентной зоной [9]. Плотность тока долины связана с избыточной компонентой плотности тока ВАХ ТД. В свою очередь эта избыточная компонента определяется концентрацией глубоких уровней внутри запрещенной зоны полупроводника и наличием (либо отсутствием) дефектов структуры различного рода. Дефекты способствуют доминированию дополнительного механизма транспорта носителей заряда, связанного с резонансным механизмом туннелирования.

Поскольку область перекомпенсации расположена между вырожденными областями n^{++} и p^{++}, она обеднена основными носителями заряда и является «эффективным» *i*-слоем. В работе [10] нами было установлено с помощью численного моделирования, что зависимость величины J_p туннельных диодов

$$n^{++}\text{-GaAs-}(\delta\text{Si})/i\text{-}(\text{GaAs}/\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As})/p^{++}\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As-}(\delta\text{Be})\ (p\text{–}i\text{–}n)$$

от толщины *i*-области является немонотонной. При этом плотность пикового тока сначала возрастает, достигая максимума, а затем снижается ввиду увеличения толщины потенциального барьера, через который туннелируют носители заряда.

Таким образом, толщина «эффективной» *i*-области, обусловленной перекомпенсацией донорной и акцепторной примесей, может влиять на величину J_p.

Кроме того, вследствие высокой концентрации доноров кремния и акцепторов бериллия, в перекомпенсированном «эффективном» *i*-слое присутствует более высокая концентрация дефектов и связанных с ними локализованных примесных состояний. В туннельных диодах с резким профилем легирования межзонное квантовое туннелирование выступает главным механизмом транспорта носителей заряда [11]. Однако при наличии значительной области перекомпенсации донорного и акцепторного профилей легирования и высокой концентрации локализованных примесных состояний в потенциальном барьере, начинает превалировать резонансное туннелирование (РТ) [12]. При этом резонанс наступает в случае совпадения энергии состояний в зоне проводимости с энергиями примесных состояний на потенциальном барьере и разрешенных состояний в валентной зоне. Теория РТ через два локализованных примесных состояния изложена в работе [13]. Согласно работам [14 – 16], значительному росту величины J_p при малых положительных напряжениях смещения на ТД способствуют локализованные состояния, совпадающие по энергии и индуцированные парой донор-акцептор. Данные предположения подтверждаются температурной зависимостью J_p в резонансных туннельных диодах.

На рис. 3,*c* (кривая *CC*) для сравнения представлена температурная зависимость ΔJ_p для двухбарьерного резонансного туннельного диода (РТД) AlGaAs/GaAs, смоделированная по модели Хартри, полученная авторами работы [17]. Анализ данной зависимости, полученной при нагреве от 300 до 400 K, показывает, что наблюдается падение величины J_p при отрицательном значении температурного коэффициента $\Delta J_p = -5$ %, так же, как и для структуры A (см. кривые *Ac*, *Ap*). При охлаждении же от 300 до 100 K величина J_p плавно растет и дает значение $\Delta J_p = 7$ %. Авторы исследования [17] объясняют наличие отрицательного температурного коэффициента ВАХ РТД при нагреве до 400 K рассеянием носителей заряда на фононах и электрон-электронным взаимодействием.

Из экспериментальных ВАХ ТД при разных температурах нами было рассчитано дифференциальное сопротивление, отвечающее за паразитные потери при падении напряжения на ТД в многопереходных ФЭП (рис. 3,*d*). Для эффективной работы МП ФЭП соединительные элементы должны обеспечивать сопротивление ниже 10 мОм·см^2 [6]. Зависимости дифференциального сопротивления исследованных образцов ТД от температуры, учитывающие сопротивление электрической схемы в криостате (около 0,7 мОм·см^2), представлены на рис. 3,*d*. Наилучшая температурная стабильность R_d наблюдается для образцов ТД структуры B (см. рис 3,*d*, кривая *Bc*). Во всем температурном диапазоне величина R_d для образцов ТД структуры B изменяется от 0,58 до 0,42 мОм·см^2. Для структуры A, при нагреве от 100 до 400 K, величина R_d изменяется от 1,59 до 0,67 мОм·см^2 для образцов ТД из центральной части и от 0,58 до 0,34 мОм·см^2 для образцов из периферийной части.

Проведенные температурные исследования прямых ВАХ позволяют заключить, что разработанные соединительные ТД структуры A обеспечивают температурную стабильность параметров J_p, ΔJ_p около 93 % и параметра R_d – примерно 59 %, тогда как структуры B обеспечивают соответственно около 83 и 72 %.

Заключение

В температурном диапазоне 100 – 400 K выполнены исследования прямых вольт-амперных характеристик соединительных туннельных диодов (ТД) вида

$$n^{++}\text{-GaAs-}(\delta\text{Si})/i\text{-}(\text{GaAs}/\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As})/p^{++}\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As-}(\delta\text{Be})$$

для двух типов структур, полученных методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Структура типа A содержала перекомпенсированный «эффективный» *i*-слой толщиной ≤ 25 нм, образованный взаимодиффузией кремния и бериллия при температуре эпитаксиального роста 500 °C. Структура типа B имела «эффективный» *i*-слой толщиной ≤ 10 нм, образованный аналогичным образом при температуре роста 450 °C.

Согласно полученным результатам, установлено, что при нагреве до 400 K для ТД структуры A наблюдается плавное снижение плотности туннельного тока J_p, в то время как для структуры B характерен линейный рост J_p. Для образцов ТД структуры A изменение значения J_p составляло 7 %, а для образцов ТД структуры B – 42 %. Такая зависимость величины J_p от температуры для структуры A связана с влиянием температурной диффузии преимущественно акцепторной примеси бериллия из слоя

$$p^{++}\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As-}(\delta\text{Be})$$

в область

$$n^{++}\text{-GaAs-}(\delta\text{Si})/i\text{-}(\text{GaAs}/\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}).$$

Указанная диффузия способствовала снижению вырождения слоя ТД n^{++}-GaAs-(δSi) за счет формирования перекомпенсированной области кремния и бериллия.

Линейный рост величины J_p с увеличением температуры для структуры B обусловлен меньшей толщиной «эффективного» i-слоя, меньшей глубиной диффузии примеси бериллия в область n^{++}-GaAs и, соответственно, бóльшим уровнем ее легирования и вырождения.

В температурном диапазоне 100 – 400 K полученные максимальные значения величины J_p составляли около 220 А/см^2 для структуры A и примерно 150 А/см^2 для структуры B. Такие значения J_p могут быть обусловлены как толщиной «эффективного» i-слоя, так и уровнем локализованных примесных состояний, инициирующих резонансное туннелирование.

На основе анализа измеренных ВАХ установлено, что в температурном диапазоне от 100 до 400 K значения дифференциального сопротивления для образцов ТД структуры A лежат в пределах R_d = 0,58 – 0,34 мОм·см^2, а для структуры B – в пределах 0,58 – 0,42 мОм·см^2.

Согласно полученным результатам, образцы ТД, которые были взяты на периферии эпитаксиальной пластины структуры A, выращенной при температуре 500°C, обеспечивают более высокую температурную стабильность и максимальные значения J_p при минимальных значениях R_d. Большая степень перекомпенсации легирующих примесей в активной области ТД, расположенных в центре пластины, приводит к снижению плотности пикового туннельного тока. Образцы структуры B, выращенной при температуре 450 °C, обеспечивают лучшую стабильность значения плотности пикового тока по пластине, но с меньшим максимальным значением J_p и худшей температурной стабильностью. Предполагаем, что оптимальные условия роста структуры ТД вида

$$n^{++}\text{-GaAs-}(\delta\text{Si})/i\text{-}(\text{GaAs}/\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As})/p^{++}\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As-}(\delta\text{Be})$$

с максимальными значениями J_p, минимальными значениями R_d и высокой температурной стабильностью будут лежать в температурном диапазоне эпитаксии $450 < T < 500$ °C.

При разработке многопереходных фотоэлектрических преобразователей мощного оптического излучения необходимо учитывать температурную диффузию примеси в высоколегированных слоях соединительных ТД. Препятствием к паразитной диффузии примеси может служить включение между высоколегированными слоями ТД нелегированного i-слоя толщиной до 10 нм, а также оптимизация температуры эпитаксиального роста. Кроме того, важно использовать лигатуру с меньшим коэффициентом диффузии, например углерод в качестве акцепторной примеси.

Отметим, что учет вклада резонансного туннелирования в соединительных ТД с высокой оптической прозрачностью может быть перспективным для создания высокоэффективных многопереходных фотоэлектрических преобразователей мощного лазерного излучения.

Исследования методом ВИМС выполнялись на оборудовании ЦКП «Материаловедение и диагностика в передовых технологиях», ФТИ им. А. Ф. Иоффе, поддерживаемом Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Зайцев Д. Ф., Андреев В. М., Биленко И. А. и др.** Первая радиофотонная фазированная антенная решетка // Радиотехника. 2021. № 4. С. 153–164.

2. **Kalinovskii V. S., Terukov E. I., Kontrosh E. V., et al.** Energy-informational hybrid photovoltaic converter of laser radiation // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1.2. Pp. 47–51.

3. **Kalinovskiy V. S., Kontrosh E. V., Gusev G. A., Sumarokov A. N., Klimko G. V., Ivanov S. V., Yuferev V. S., Tabarov T. S., Andreev V. M.** Study of PV characteristics of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$/GaAs photodiodes // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 993. P. 012029.

4. **Wang A.-Ch., Sun Y.-R., Yu Sh.-Zh., Yin J.-J., Zhang W., Wang J.-Sh., Fu Q.-X., Han Y.-H., Qin J., Dong J.-R.** Characteristics of 1520 nm InGaAs multijunction laser power converters // Applied Physics Letters. 2021. Vol. 119. No. 24. P. 243902.

5. **Hoheisel R., Bett A. W., Warner J. H., Walters R. J., Jenkins P.** Low temperature low intensity effects in III-V photovoltaic devices for deep space missions // Proceedings of the IEEE 7th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC) (A Joint Conference of 45th IEEE PVSC, 28th PVSEC & 34th EU PVSEC). June 10–15, 2018. Pp. 3763–3767.

6. **Lumb M. P., González M., Yakes M. K., Affouda C. A., Bailey C. G., Walters R. J.** High temperature current–voltage characteristics of InP-based tunnel junctions // Progress in Photovoltaics. 2015. Vol. 23. No. 6. Pp. 773–782.

7. **Baudrit M., Algora C.** Tunnel diode modeling, including nonlocal trap-assisted tunneling: A focus on III–V multijunction solar cell simulation // IEEE Transactions on Electron Devices. 2010. Vol. 57. No. 10. Pp. 2564–2571.

8. **Tabe M., Tan H. N., Mizuno T., Muruganathan M., Anh L. T., Mizuta H., Nuryadi R., Moraru D.** Atomistic nature in band-to-band tunneling in two-dimensional silicon *pn* tunnel diods // Applied Physics Letters. 2016. Vol. 108. No. 9. P. 093502.

9. **Зи С.** Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. Пер. с англ. 2-е, перераб. и доп. изд. М.: Мир, 1984. Кн. 1 – 456 с., Кн. 2 – 456 с.

10. **Калиновский В. С., Контрош Е. В., Климко Г. В., Иванов С. В., Юферев В. С., Бер Б. Я., Казанцев Д. Ю., Андреев В. М.** Разработка и исследование туннельных *p–i–n*-диодов GaAs/AlGaAs для многопереходных преобразователей мощного лазерного излучения // Физика и техника полупроводников. 2020. Т. 54. № 3. С. 285–291.

11. **Esaki L.** New phenomenon in narrow germanium *p–n* junctions // Physical Review. 1958. Vol. 109. No. 2. Pp. 603–604.

12. **Savchenko A. K., Kuznetsov V. V., Woolfe A., Mace D. R., Pepper M., Ritchie D. A., Jones G. A. C.** Resonant tunneling through two impurities in disordered barriers // Physical Review. B. 1995. Vol. 52. No. 24. Pp. R17021–R17024.

13. **Ларкин А. И., Матвеев К. А.** Вольт-амперная характеристика мезоскопических полупроводниковых контактов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1987. Т. 93. № 3 (9). С. 1030–1038.

14. **Jandieri K., Baranovskii S. D., Rubel O., Stolz W., Gebhard F., Guter W., Hermle M., Bett A. W. J.** Resonant electron tunneling through defects in GaAs tunnel diodes // Applied Physics. 2008. Vol. 104. No. 9. P. 094506.

15. **Prabhudesai G., Muruganathan M., Anh L.T., Mizuta H., Hori M., Ono Y., Tabe M., Moraru D.** Single-charge band-to-band tunneling via multiple-dopant clusters in nanoscale Si Esaki diodes // Applied Physics Letters. 2019. Vol. 114. No. 24. P. 243502.

16. **Prabhudesai G., Yamaguchi K., Tabe M., Moraru D.** Coulomb-blockade charge-transport mechanism in band-to-band tunneling in heavily-doped low-dimensional silicon Esaki diodes // Proceedings of the IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop (SNW). Honolulu, Hawaii, USA, June 13–14, 2020. Pp. 109–110.

17. **Saha S., Biswas K., Hasan M.** Temperature comparison of GaAs/AlGaAs based double barrier resonant tunneling diode considering NEGF // Proceedings of the 4th International Conference on Advances in Electrical Engineering (ICAEE). Bangladesh, September 28–30, 2017. Pp. 44–47.

REFERENCES

1. **Zaitsev D. F., Andreev V. M., Bilenko I. A., et al.,** First radiophoton phased antenna array, Radiotekhnika. 85 (4) (2021) 153–164 (in Russian).

2. **Kalinovskii V. S., Terukov E. I., Kontrosh E. V., et al.,** Energy-informational hybrid photovoltaic converter of laser radiation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1.2) (2023) 47–51.

3. **Kalinovskiy V. S., Kontrosh E. V., Gusev G. A., et al.,** Study of PV characteristics of $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs photodiodes, J. Phys. Conf. Ser. 993 (2018) 012029.

4. **Wang A.-Ch., Sun Y.-R., Yu Sh.-Zh., et al.,** Characteristics of 1520 nm InGaAs multijunction laser power converters, Appl. Phys. Lett. 119 (24) (2021) 243902.

5. **Hoheisel R., Bett A. W., Warner J. H., et al.,** Low temperature low intensity effects in III-V photovoltaic devices for deep space missions, Proc. IEEE 7th World Conf. Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC) (A Joint Conf. 45th IEEE PVSC, 28th PVSEC & 34th EU PVSEC). June 10–15 (2018) 3763–3767.

6. **Lumb M. P., González M., Yakes M. K., et al.,** High temperature current–voltage characteristics of InP-based tunnel junctions, Prog. Photovoltaic. 23 (6) (2015) 773–782.

7. **Baudrit M., Algora C.,** Tunnel diode modeling, including nonlocal trap-assisted tunneling: A focus on III–V multijunction solar cell simulation, IEEE Trans. Electron Devices. 57 (10) (2010) 2564–2571.

8. **Tabe M., Tan H. N., Mizuno T., et al.,** Atomistic nature in band-to-band tunneling in two-dimensional silicon pn tunnel diods, Appl. Phys. Lett. 108 (9) (2016) 093502.

9. **Sze S. M.,** Physics of semiconductor devices, 2nd Ed., A Wiley-Interscience Publ., J. Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbar, Toronto, Singapore, 1981.

10. **Kalinovskii V. S., Kontrosh E. V., Klimko G. V., et al.,** Development and study of the *p–i–n* GaAs/AlGaAs tunnel diodes for multijunction converters of high-power laser radiation, Semiconductors. 54 (3) (2020) 355–361.

11. **Esaki L.,** New phenomenon in narrow germanium *p–n* junctions, Phys. Rev. 109 (2) (1958) 603–604.

12. **Savchenko A. K., Kuznetsov V. V., Woolfe A., et al.,** Resonant tunneling through two impurities in disordered barriers, Phys. Rev. B. 52 (24) (1995) R17021–R17024.

13. **Larkin A. I., Matveev K. A.** Current-voltage characteristics of mesoscopic semiconductor contacts, Soviet Physics. JETP. 66 (3) (1987) 580–584.

14. **Jandieri K., Baranovskii S. D., Rubel O., et al.,** Resonant electron tunneling through defects in GaAs tunnel diodes, Appl. Phys. 104 (9) (2008) 094506.

15. **Prabhudesai G., Muruganathan M., Anh L.T., et al.,** Single-charge band-to-band tunneling via multiple-dopant clusters in nanoscale Si Esaki diodes, Appl. Phys. Lett. 114 (24) (2019) 243502.

16. **Prabhudesai G., Yamaguchi K., Tabe M., Moraru D.,** Coulomb-blockade charge-transport mechanism in band-to-band tunneling in heavily-doped low-dimensional silicon Esaki diodes, Proc. IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop (SNW), Honolulu, Hawaii, USA, June 13–14 (2020) 109–110.

17. **Saha S., Biswas K., Hasan M.,** Temperature comparison of GaAs/AlGaAs based double barrier resonant tunneling diode considering NEGF, Proc. 4th Int. Conf. on Advances in Electrical Engineering (ICAEE). Bangladesh, Sept. 28–30 (2017) 44–47.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНТРОШ Евгений Владимирович – *научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
kontrosh@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1812-3714

КАЛИНОВСКИЙ Виталий Станиславович – *старший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
vitak.sopt@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4858-7544

КЛИМКО Григорий Викторович – *младший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
gklimko@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8893-7751

БЕР Борис Яковлевич – *старший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
boris.ber@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-2934-4176

ПРУДЧЕНКО Ксения Константиновна – *младший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
prudchenkokk@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4437-2984

ТОЛКАЧЕВ Иван Андреевич – *младший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
TolkachevIA@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0001-8202-7087

КАЗАНЦЕВ Дмитрий Юрьевич – *старший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Dukazantsev@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-2173-1278

THE AUTHORS

KONTROSH Evgeniy V.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
kontrosh@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1812-3714

KALINOVSKII Vitaliy S.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
vitak.sopt@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4858-7544

KLIMKO Grigory V.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
gklimko@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8893-7751

BER Boris Ya.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
boris.ber@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-2934-4176

PRUDCHENKO Kseniia K.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
prudchenkokk@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4437-2984

TOLKACHEV Ivan A.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
TolkachevIA@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0001-8202-7087

KAZANTSEV Dmitry Yu.
Ioffe Institute of RAS
26, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
Dukazantsev@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-2173-1278

Статья поступила в редакцию 14.07.2023. Одобрена после рецензирования 03.08.2023. Принята 03.08.2023.

Received 14.07.2023. Approved after reviewing 03.08.2023. Accepted 03.08.2023.

Научная статья
УДК 539.1.043
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16404

ОСОБЕННОСТИ НАКОПЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ НАРУШЕНИЙ ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ РАЗНЫХ МАСС В АЛЬФА-ОКСИД ГАЛЛИЯ ПРИ МАЛЫХ УРОВНЯХ ПОВРЕЖДЕНИЯ

А. И. Клевцов [1, 2] ✉, **П. А. Карасев** [1],
К. В. Карабешкин [1], **А. И. Титов** [1]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;
[2] Научно-производственное предприятие «ЭЛАР», Санкт-Петербург, Россия
✉ klevtsov_ai@spbstu.ru

Аннотация. В работе получены распределения структурных нарушений при облучении альфа-фазы оксида галлия ионами фтора, фосфора и ксенона с энергией, измеряемой килоэлектронвольтами (температура комнатная). Установлено заметное влияние усредненной плотности индивидуальных каскадов столкновений на эффективность введения стабильных нарушений для поверхностного пика радиационных дефектов. В отличие от случаев ионной имплантации во многие другие полупроводники, впервые обнаружено, что в альфа-Ga_2O_3 между поверхностным и объемным максимумами структурных нарушений возникает дополнительный пик. Этот промежуточный максимум ясно виден на спектрах резерфордовского обратного рассеяния при малых уровнях повреждения. Изучены характерные особенности впервые обнаруженного максимума.

Ключевые слова: оксид галлия, ионная имплантация, радиационный дефект, каскады столкновений, резерфордовское обратное рассеяние

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00166).

Для цитирования: Клевцов А. И., Карасев П. А., Карабешкин К. В., Титов А. И. Особенности накопления структурных нарушений при имплантации ионов разных масс в альфа-оксид галлия при малых уровнях повреждения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 42–49. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16404

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16404

PECULIARITIES OF STRUCTURE DAMAGE ACCUMULATION UNDER THE IMPLANTATION OF IONS OF DIFFERENT MASSES INTO ALPHA-GALLIUM OXIDE AT LOW DAMAGE LEVELS

A. I. Klevtsov [1, 2] ✉, **P. A. Karaseev** [1],
K. V. Karabeshkin [1], **A. I. Titov** [1]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;
[2] Joint-Stock Company “"Research and Production Enterprise "ELAR"”, St. Petersburg, Russia

✉ klevtsov_ai@spbstu.ru

Abstract. In the paper, the distributions of structure damage created in alpha-phase of gallium oxide by keV fluorine, phosphorus and xenon ion irradiation, have been obtained at room temperature. A noticeable effect of the average individual collision cascade density on the stable damage production efficiency at the surface was established. In contrast to many other semiconductors, an intermediate damage peak appeared in the alpha-Ga_2O_3 between the surface and bulk maxima. This intermediate peak visible in the RBS/C spectra at low damage levels was discovered for the first time. Characteristic peculiarities of the discovered maximum were investigated.

Keywords: gallium oxide, ion implantation, radiation defect, collision cascades, Rutherford backscattering

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-19-00166).

For citation: Klevtsov A. I., Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Titov A. I., Peculiarities of structure damage accumulation under the implantation of ions of different masses into alpha-gallium oxide at low damage levels, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 42–49. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16404

Введение

Ионное облучение является одним из важных методов модификации структуры вещества в ряду современных технологий и инструментов исследования свойств различных материалов. Известно, что имплантация ионов в полупроводники всегда сопровождается образованием устойчивых структурных нарушений. Необходимость анализа ионно-стимулированных процессов, в частности возникновения повреждений структуры в материалах, обусловлена, в основном, двумя прикладными задачами. Во-первых, радиационное повреждение выступает в качестве основного лимитирующего фактора при разработке технологий ионно-лучевой обработки для изготовления электронных приборов. Во-вторых, часто возникает необходимость определять стойкость электронных приборов, работающих в условиях высоких радиационных нагрузок и находить возможности ее повышения. Поэтому соответствующие исследования начаты уже довольно давно. Однако радиационные дефекты в бинарных и более сложных по составу материалах имеют комплексную природу и остаются малоизученными.

Для исследования накопления нарушений кристаллической структуры при ионной бомбардировке часто используется метод резерфордовского обратного рассеяния быстрых ионов гелия в сочетании с каналированием (*англ.* Rutherford Backscattering/Channeling (RBS/C)) [1]. С помощью этого метода установлено, что при облучении многих полупроводников, по крайней мере легкими ионами, распределения формируемых нарушений по глубине имеют бимодальный характер [2 – 5]. При этом формируется объемный максимум дефектов (ОМД), который обычно располагается на глубине максимума упругих потерь энергии тормозящихся ионов [3, 4], т. е. там, где генерируется основная масса первичных точечных дефектов. Кроме того, происходит разупорядочение кристаллической структуры непосредственно у поверхности бомбардируемой мишени. Этот поверхностный максимум дефектов (ПМД) возникает вследствие диффузии первичных дефектов к поверхности полупроводника и их последующей коагуляции на этой поверхности (см., например, статью [6]). Помимо этого, иногда на распределении дефектов по глубине обнаруживается еще один максимум, локализованный между ПМД и ОМД; примером может служить результат облучения оксида цинка тяжелыми ионами. Такой максимум дефектов получил название промежуточного (ПрМД) [7 – 9]. В случае облучения оксида цинка ионами ксенона с энергией 500 кэВ причиной возникновения ПрМД является образование сильно дефектного слоя, обогащенного цинком [9].

Одним из наиболее перспективных полупроводниковых материалов для создания электронных приборов высокой мощности и оптоэлектроники нового поколения является оксид галлия Ga_2O_3, обладающий такими преимуществами, как большая ширина запрещенной зоны (4,5 – 5,3 эВ для разных фаз), высокое значение напряжения пробоя (около 8 МВ/см) и др. [10]. Ранее были получены одни из первых данных по накоплению структурных нарушений в α-Ga_2O_3 [11, 12] и β-Ga_2O_3 [11, 13] при их бомбардировке ускоренными атомарными ионами. Обнаруженное распределение стабильных нарушений структуры как для стабильной β-фазы, так и для метастабильного α-политипа, имеет бимодальный характер. Доза ионов, необходимая для достижения приблизительно одинакового уровня разупорядочения для α-Ga_2O_3, примерно в 10 раз выше, чем для стабильной β-фазы [11]. Дальнейшее развитие этих исследований показало, что при ионном облучении альфа-фазы оксида галлия могут возникать условия, при которых будет наблюдаться ПрМД.

Цель настоящего исследования – описать обнаружение ПрМД в полупроводниковом материале α-Ga_2O_3 при ионном облучении и выяснить условия его появления.

Методика эксперимента

В работе исследовались эпитаксиальные слои альфа-фазы оксида галлия (α-Ga_2O_3) со структурой корунда толщиной примерно 2 мкм с ориентацией (0001), выращенные на *c*-плоскости сапфировой подложки методом хлорид-гидридной газофазной эпитаксии (*англ.* Hydride Vapour-Phase Epitaxy (HVPE)).

Образцы облучали ионами фтора, фосфора и ксенона при комнатной температуре на (500 кВ)-имплантере производства HVEE (Нидерланды). Облучение проводилось под углом 7° от направления [0001] для минимизации эффектов каналирования. Параметры облучения были подобраны таким образом, чтобы генерация первичных дефектов, создаваемых тормозящимися ионами, была приблизительно одинаковой по глубине мишени во всех случаях. Для этого значения энергий и токов ионов выбирали такими, чтобы при облучении ионами разной природы профили распределения концентраций смещенных атомов по глубине были подобными и различались только высотой максимума.

Профили генерации смещений рассчитывались в приближении парных столкновений [14] . Дозы ионов выражались в среднем количестве первичных смещений атомов мишени (*англ.* displacements per atom (dpa)), рассчитываемом на глубине максимума функции генерации. Расчет величины dpa производился кодом TRIM (версия SRIM-2013, http://www.srim.org.) [14]. Плотность ионного потока при облучении различными ионами поддерживалась одинаковой в единицах dpa/c. Для удобства сравнения профилей распределения структурных нарушений при облучении различными типами ионов, дозы подбирались так, чтобы уровни повреждения в области ПМД были не слишком высокими и близкими друг к другу. Кроме того, для более глубокого изучения обнаруженного эффекта путем сравнения, было проведено облучение ионами иной природы (фосфора) и с более высокой энергией (65 кэВ) при тех же значениях дозы и плотности тока и в единицах dpa, и dpa/c, что были использованы ранее.

Степень разупорядочения структуры кристалла после облучения измерялась методом резерфордовского обратного рассеяния в сочетании с каналированием (RBS/C). Для измерения использовался зондирующий пучок ионов гелия He^{++} с энергией 0,7 МэВ в направлении [0001]. Детектор рассеянных частиц располагался под углом 103° относительно направления падающего пучка. Для построения распределений относительного разупорядочения по глубине, полученные спектры RBS/C обрабатывались по стандартному алгоритму [15].

Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1,*a* приведены распределения структурных нарушений по глубине мишени α-Ga_2O_3, полученные после имплантации ионов с разной массой. Как уже отмечалось, дозы облучения были выбраны таким образом, чтобы результирующие уровни повреждения в области поверхностного максимума были не слишком высокими и достаточно близкими друг к другу. Нетрудно видеть, что значения доз, отвечающие этим требованиям, тем ниже, чем больше масса иона. Действительно, для достижения в ПМД разупорядочения порядка 0,15 облучением ионами ксенона Xe требуется доза 0,30 dpa, ионами фосфора P – 0,44 dpa, а ионами фтора F – уже 1,50 dpa. Напомним, что условия ионной бомбардировки были выбраны такими, чтобы скорости генерации первичных дефектов в бинарном приближении [14] и распределения дефектов по глубине совпадали для ионов разного типа.

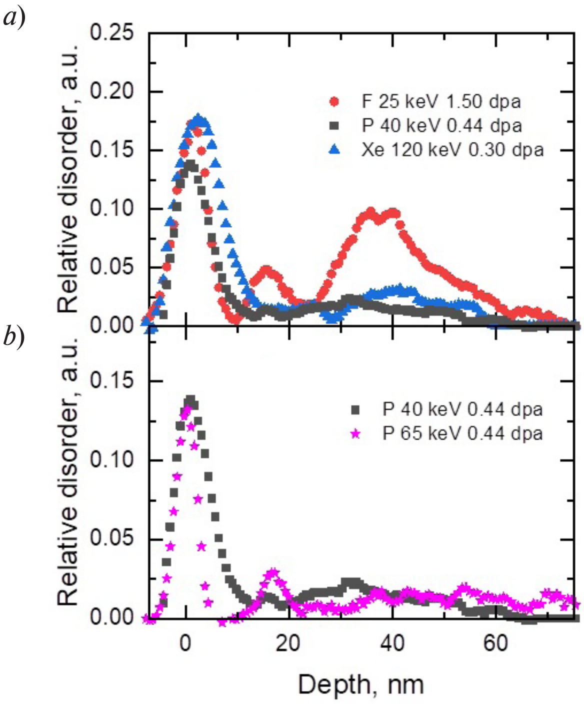


Рис. 1. Распределения концентрации относительного разупорядочения по глубине мишени α-Ga_2O_3 после облучения ионами разных масс с разными энергиями и дозами (указаны на рисунке):
a – ионами фтора, фосфора и ксенона; *b* – только ионами фосфора с двумя разными энергиями и одинаковой дозой. Плотности ионного потока составляли (10^{-3} dpa/c): 2,41 (для ионов фтора) и 0,08 (для остальных ионов)

Из этих результатов следует, что на уровень повреждения кристаллической структуры α-Ga_2O_3 существенное влияние может оказывать еще один параметр, который изменяется от иона к иону при такой постановке эксперимента; этот параметр – усредненная плотность индивидуальных каскадов смещений. Прежние экспериментальные исследования показали, что облучение молекулярными ионами приводит к более эффективному формированию ПМД; на это указывали результаты, полученные при облучении оксида галлия более высокими дозами ионов [12]. Ранее, в работе [16] мы предложили рассчитывать значение указанного параметра на основе приближения парных столкновений.

На рис. 2 представлены зависимости плотности каскадов, создаваемых ионами в мишени из альфа-оксида галлия, от ее глубины, которые были получены расчетным путем на такой основе. Видно, что плотность каскадов, создаваемых ионами фтора, меньше, чем таковая, создаваемая ионами фосфора и ксенона. Таким образом, и в этом случае, при довольно малых дозах и токах ионов, увеличение плотности каскадов смещений приводит к повышению эффективности формирования поверхностного максимума дефектов.

Обращает на себя внимание и появление еще одного хорошо различимого пика между ПМД и ОМД на кривой,

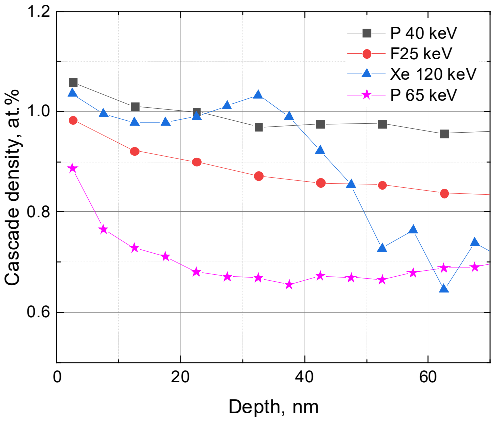


Рис. 2. Распределения плотности индивидуальных каскадов смещений по глубине мишени α-Ga_2O_3 после облучения ионами разных масс с разными энергиями (указаны на рисунке). Расчеты выполнены на основе приближения парных столкновений [14] по методу, предложенному в работе [16]

представленной на рис. 1,*a* (распределение концентрации дефектов при бомбардировке ионами фтора с энергией 25 кэВ). Этот промежуточный максимум дефектов (ПрМД) расположен на глубине мишени α-Ga_2O_3 около 17 нм. По нашему мнению, аналогичный пик присутствует и на распределении, полученном при облучении ионами фосфора с энергией 40 кэВ. В случае же бомбардировки альфа-оксида галлия более тяжелыми ионами ксенона этот максимум не наблюдается. Отметим, что появление ПрМД – это новый феномен, который мы не наблюдали при имплантации ионов до более высоких доз.

Для дальнейшего исследования этого феномена было проведено облучение ионами фосфора с более высокой энергией (65 кэВ) и той же дозой (0,44 dpa). Полученное распределение структурных нарушений показано на рис. 1, *b*. Видно, что ширина поверхностного максимума с повышением энергии ионов фосфора становится несколько меньше. Кроме того, в этом случае в альфа-оксиде галлия наблюдается формирование довольно заметного промежуточного максимума, приблизительно на той же глубине, что наблюдался ранее для ионов фтора (см. рис. 1, *a* и *b*). Таким образом, ПрМД формируется не только при облучении ионами фтора, но и ионами фосфора. С повышением энергии ионов фосфора ПрМД становится более выраженным.

Как уже отмечалось выше, ПрМД ранее был обнаружен при имплантации ионов в оксид цинка. Однако природа его возникновения для данного случая (α-Ga_2O_3) и для ZnO, по-видимому, различна. Действительно, в оксиде цинка формирование ПрМД происходит только при облучении тяжелыми ионами и он заметен в широком диапазоне доз. Величина ПрМД в оксиде цинка не зависела от природы иона. В случае оксида α-Ga_2O_3 мы наблюдаем ПрМД только при облучении легкими ионами и при малых дозах. Величина ПрМД в оксиде галлия при одинаковых условиях ионной бомбардировки – разная для ионов фосфора и фтора, и для ионов фосфора она возрастает с увеличением энергии.

Стоит обратить внимание на различия в поведении кривых распределения плотности индивидуальных каскадов смещений для всех экспериментально рассмотренных случаев (см. рис. 2). Видно, что вблизи поверхности наиболее высокое значение параметра обнаруживается при торможении тяжелых ионов ксенона. Ионы фосфора с энергией 40 кэВ формируют каскады с меньшей плотностью, а для ионов фтора значения плотности еще ниже. С увеличением энергии ионов фосфора от 40 до 65 кэВ плотность каскадов смещений снижается. Таким образом, в мишени α-Ga_2O_3, в отличие от ZnO, ПрМД возникает при малой плотности каскадов, а не при большой.

В то же время причины появления ПрМД на спектре пока не ясны. Для выявления деталей поведения и механизма образования ПрМД в α-Ga_2O_3 необходимы дальнейшие многосторонние и более глубокие исследования.

Заключение

В работе экспериментально получены распределения структурных нарушений по глубине при имплантации в полупроводниковый материл α-Ga_2O_3 малых доз ионов фтора, фосфора и ксенона в диапазоне энергий, измеряемых килоэлектронвольтами. Рассчитана усредненная плотность индивидуальных каскадов смещений; результаты расчета, наряду с экспериментальными данными, указывают на рост эффективности радиационного повреждения оксида галлия при увеличении такой плотности.

Обнаружено, что для использованных ионов со средними массами и выбранных технологических доз ионная бомбардировка мишени из оксида галлия, в отличие от других материалов мишени, приводит к появлению дополнительного максимума структурных нарушений, который расположен между поверхностным и объемными максимумами на соответствующих кривых распределений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Фелдман Л., Майер Д.** Основы анализа поверхности и тонких пленок. М.: Мир, 1989. 344 с.

2. **Gerasimov A. I., Zorin E. I., Pavlov P. V., Tetelbaum D. I.** On the peculiarities of silicon amorphization at ion bombardment // Physica Status Solidi. 1972. Vol. 12. No. 2. Pp. 679–685.

3. **Kucheyev S. O., Williams J. S., Pearton S. J.** Ion implantation into GaN // Materials Science and Engineering: R: Reports. 2001. Vol. 33. No. 2—3. Pp. 51—107.

4. **Azarov A. Yu., Titov A. I., Karaseov P. A., Hallén A.** Effect of collision cascade density on radiation damage in SiC // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2009. Vol. 267. No. 8—9. Pp. 1247—1250.

5. **Kucheyev S. O., Williams J. S., Jagadish C., Zou J., Evans C., Nelson A. J., Hamza A. V.** Ion-beam-produced structural defects in ZnO // Physical Review B. 2003. Vol. 67. No. 9. P. 094115.

6. **Titov A. I., Belyakov V. S., Azarov A. Yu.** Formation of surface amorphous layers in semiconductors under low-energy light-ion irradiation: Experiment and theory // Nuclear Instruments and Methods B. 2003. Vol. 212. December. Pp. 169–178.

7. **Azarov A. Yu., Kucheyev S. O., Titov A. I., Karaseov P. A.** Effect of density of collision cascades on ion implantation damage in ZnO // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 102. No. 8. P. 083547.

8. **Azarov A. Yu., Titov A. I., Karaseov P. A., Kucheyev S. O., Hallén A., Kuznetsov A. Yu., Svensson B. G., Pathak A. P.** Structural damage in ZnO bombarded by heavy ions // Vacuum. 2010. Vol. 84. No. 8. Pp. 1058—1061.

9. **Myers M. T., Charnvanichborikarn S., Wei C. C., Luo Z. P., Aitkaliyeva A., Shao L., Kucheyev S. O.** Defect microstructure in heavy-ion-bombarded (0001) ZnO // Acta Materialia. 2012. Vol. 60. No. 17. Pp. 6086—6090.

10. **Pearton S. J., Ren F., Mastro M.** (Eds.). Gallium oxide. Technology, devices and applications. Amsterdam: Elsevier Inc., 2019. 479 p.

11. **Titov A. I., Karabeshkin K. V., Struchkov A. I. Nikolaev V. I., Azarov A. Yu., Gogova D. S., Karaseov P. A.** Comparative study of radiation tolerance of GaN and Ga_2O_3 polymorphs // Vacuum. 2022. Vol. 200. June. P. 111005.

12. **Карасев П. А., Карабешкин К. В., Стручков А. И., Печников А. И., Николаев В. И., Андреева В. Д., Титов А. И.** Накопление структурных нарушений при облучении α-Ga_2O_3 ионами P и PF_4 // Физика и техника полупроводников. 2022. Т. 56. № 9. С. 882–887.

13. **Azarov A., Venkatachalapathy V., Karaseov P., Titov A., Karabeshkin K., Struchkov A., Kuznetsov A.** Interplay of the disorder and strain in gallium oxide // Scientific Reports. 2022. Vol. 12. No. 1. 13 September. P. 15366.

14. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.** The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985. 321 p.

15. **Schmid K.** Some new aspects for the evaluation of disorder profiles in silicon by backscattering // Radiation Effects. 1973. Vol. 17. No. 3—4. Pp. 201—207.

16. **Kucheyev S. O., Azarov A. Yu., Titov A. I., Karaseov P. A., Kuchumova T. M.** Energy spike effects in ion-bombarded GaN // Journal of Physics D: Applied Physics. 2009. Vol. 42. No. 8. P. 085309.

REFERENCES

1. **Feldman L. C., Mayer J. W.,** Fundamentals of surface and thin films analysis, Pearson College Div., London, 1986.

2. **Gerasimov A. I., Zorin E. I., Pavlov P. V., Tetelbaum D. I.,** On the peculiarities of silicon amorphization at ion bombardment, Phys. Status Solidi. 12 (2) (1972) 679–685.

3. **Kucheyev S. O., Williams J. S., Pearton S. J.,** Ion implantation into GaN, Mat. Sci. Eng. R Rep. 33 (2—3) (2001) 51—107.

4. **Azarov A. Yu., Titov A. I., Karaseov P. A., Hallén A.,** Effect of collision cascade density on radiation damage in SiC, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 267 (8—9) (2009) 1247—1250.

5. **Kucheyev S. O., Williams J. S., Jagadish C., et al.,** Ion-beam-produced structural defects in ZnO, Phys. Rev. B. 67 (9) (2003) 094115.

6. **Titov A. I., Belyakov V. S., Azarov A. Yu.,** Formation of surface amorphous layers in semiconductors under low-energy light-ion irradiation: Experiment and theory, Nucl. Instrum. Meth. B. 212 (Dec) (2003) 169–178.

7. **Azarov A. Yu., Kucheyev S. O., Titov A. I., Karaseov P. A.,** Effect of density of collision cascades on ion implantation damage in ZnO, J. Appl. Phys. 102 (8) (2007) 083547.

8. **Azarov A. Yu., Titov A. I., Karaseov P. A., et al.,** Structural damage in ZnO bombarded by heavy ions, Vacuum. 84 (8) (2010) 1058—1061.

9. **Myers M. T., Charnvanichborikarn S., Wei C. C., et al.,** Defect microstructure in heavy-ion-bombarded (0001) ZnO, Acta Mater. 60 (17) (2012) 6086–6090.

10. **Pearton S. J., Ren F., Mastro M.** (Eds.), Gallium oxide. Technology, devices and applications, Elsevier Inc., Amsterdam, 2019.

11. **Titov A. I., Karabeshkin K. V., Struchkov A. I., et al.,** Comparative study of radiation tolerance of GaN and Ga_2O_3 polymorphs, Vacuum. 200 (June) (2022) 111005.

12. **Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Struchkov A. I., et al.,** Radiation damage accumulation in α-Ga_2O_3 under P and PF4 ion bombardment, Semiconductors. 56 (9) (2022) 664–669.

13. **Azarov A., Venkatachalapathy V., Karaseov P., et al.,** Interplay of the disorder and strain in gallium oxide, Sci. Rep. 12 (1; 13 Sept) (2022) 15366.

14. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.,** The stopping and range of ions in solids, Pergamon Press, NY, 1985.

15. **Schmid K.,** Some new aspects for the evaluation of disorder profiles in silicon by backscattering, Radiat. Eff. 17 (3–4) (1973) 201–207.

16. **Kucheyev S. O., Azarov A. Yu., Titov A. I., et al.,** Energy spike effects in ion-bombarded GaN, J. Phys. D: Appl. Phys. 42 (8) (2009) 085309.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КЛЕВЦОВ Антон Игоревич — *аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, инженер Акционерного общества “Научно-производственное предприятие «ЭЛАР»”, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
klevtsov_ai@spbstu.ru
ORCID: 0009-0004-6988-9685

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

КАРАБЕШКИН Константин Валерьевич — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yanikolaus@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1770-1877

ТИТОВ Андрей Иванович — *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
andrei.titov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

THE AUTHORS

KLEVTSOV Anton I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Joint-Stock Company "Research and Production Enterprise «ELAR»"
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
klevtsov_ai@spbstu.ru
ORCID: 0009-0004-6988-9685

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

KARABESHKIN Konstantin V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
yanikolaus@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1770-1877

TITOV Andrei I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
andrei.titov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

Статья поступила в редакцию 27.10.2023. Одобрена после рецензирования 12.11.2023. Принята 12.11.2023.

Received 27.10.2023. Approved after reviewing 12.11.2023. Accepted 12.11.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья
УДК 532.5.013.4
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16405

СРАВНЕНИЕ ДВУХ ПОДХОДОВ К ГЛОБАЛЬНОМУ АНАЛИЗУ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ ОБТЕКАНИЯ ЦИЛИНДРА

В. Д. Голубков ✉, **А. В. Гарбарук**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ golubkovvd@gmail.com

Аннотация. В работе впервые проведено прямое сравнение двух основных подходов к вычислению якобиана уравнений Навье – Стокса: континуального (КП) и дискретного (ДП). На базе собственного конечно-объемного кода для моделирования течений реализован ДП к вычислению якобиана (в дополнение к уже существующему КП). ДП был успешно верифицирован путем сравнения полученного численного результата с решением нестационарных уравнений Навье – Стокса. Сравнение двух подходов проведено на примере ламинарного обтекания цилиндра идеальным газом при околокритических числах Рейнольдса (Re = 50 и 60). Установлено, что КП точнее предсказывает показатель роста возмущений, а ДП – их частоту и амплитуду в целом. Полученные результаты позволяют утверждать, что КП и ДП равнозначны по порядку точности и выбор конкретного подхода для проведения анализа устойчивости может определяться другими критериями (например, простота реализации, вычислительные затраты и др.).

Ключевые слова: глобальный анализ устойчивости, якобиан уравнений Навье – Стокса, автоматическое дифференцирование

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-11-00041).

Для цитирования: Голубков В. Д., Гарбарук А. В. Сравнение двух подходов к глобальному анализу гидродинамической устойчивости на примере задачи обтекания цилиндра // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 50–62. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16405

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16405

A COMPARISON OF TWO APPROACHES TO THE GLOBAL STABILITY ANALYSIS USING THE EXAMPLE OF THE CYLINDER FLOW PROBLEM

V. D. Golubkov ✉, **A. V. Garbaruk**

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

✉ golubkovvd@gmail.com

Abstract. In the paper, the two main approaches to calculating the Jacobian of the Navier–Stokes equations, namely, the continuum (CA) and discrete (DA) approaches, have been directly compared for the first time. The DA to calculating this Jacobian was implemented based on in-house finite-volume code for hydrodynamics simulation (in addition to the already existing CA). The DA was successfully verified by comparison between the obtained numerical result and that of solving the transient Navier—Stokes equations. The comparison of these approaches was carried out using the example of a laminar flow past a cylinder by a perfect gas at the near-critical Reynolds numbers (Re = 50 and 60). It was established that the CA predicted the growth rate of perturbations more accurately, while the DA did their frequency and amplitude in toto. The results obtained allow to assert that both CA and DA are equivalent in terms of accuracy, and the choice of a particular approach for analyzing the stability may be determined by other criteria, e. g., ease of implementation, computational work and so on.

Keywords: global stability analysis, Navier—Stokes equations, Jacobian, automatic differentiation

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-11-00041).

For citation: Golubkov V. D., Garbaruk A. V., A comparison of two approaches to the global stability analysis using the example of the cylinder flow problem, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 50—62. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16405

Введение

Одним из наиболее мощных и развитых инструментов исследования устойчивости течений вязкой жидкости является линейная теория устойчивости, в рамках которой рассматривается развитие малых возмущений, не взаимодействующих друг с другом. В XX веке большинство исследований базировалось на линейной теории гидродинамической устойчивости в рамках локально-параллельного подхода (уравнение Орра — Зоммерфельда) или двумерных параболизованных уравнений (см. книги [1, 2] и обзорную статью [3]). Развитие вычислительной техники позволило к концу XX века проводить линейный анализ устойчивости двумерных и даже трехмерных решений уравнений Навье — Стокса; такой подход получил в литературе название глобального анализа устойчивости (ГАУ) [4].

В рамках ГАУ динамика развития малых возмущений определяется матрицей производных от определяющих уравнений по всем переменным, т. е. якобианом стационарных уравнений Навье — Стокса (точнее, его дискретной формой). В настоящее время применяются два различных подхода к вычислению этого якобиана. Так, в работах [5 — 9], охватывающих широкий круг задач ГАУ двух-, трех- и квазитрехмерных течений, использовался подход, названный в статье [10] континуальным. Его суть состоит в первоначальной линеаризации уравнений Навье — Стокса, приводящей к получению аналитического выражения для их якобиана, для которого затем формируется дискретное приближение при помощи той или иной разностной схемы. В противоположность этому методу, в работах [11 — 18] использовался подход, называемый дискретным, в котором изначально дискретизируются определяющие уравнения, затем проводится их линеаризация.

Матрицы якобианов, полученные с помощью этих подходов, различаются, так как в общем случае операции линеаризации и дискретизации некоммутативны [10]. Однако по мере измельчения сетки разница между результатами этих подходов должна уменьшаться. Аспекты применения континуального и дискретного подходов были исследованы в контексте решения сопряженных уравнений для задач оптимизации [19, 20]. Но сравнение этих подходов при проведении ГАУ не было освещено в литературе и выбор конкретного подхода в работах [5 — 18] не был обоснован.

Этот факт и определил цель настоящей работы, состоящую в сравнении результатов ГАУ при использовании различных способов расчета матрицы якобиана на примере ламинарного обтекания цилиндра совершенным газом при околокритических числах Рейнольдса.

Глобальный анализ устойчивости стационарных ламинарных течений

Методика исследования глобальной устойчивости ламинарных течений содержит два основных этапа.

На первом находится численное решение обобщенной системы стационарных уравнений Навье – Стокса, включающей уравнения неразрывности, сохранения количества движения и энергии, которую можно записать в операторной форме:

$$R(q)=0, \tag{1}$$

где $q=\{\rho,\rho u,\rho v,\rho E\}^T$ – вектор консервативных переменных; R – нелинейный дифференциальный оператор стационарных уравнений Навье – Стокса.

Решение стационарных уравнений Навье – Стокса, удовлетворяющее уравнению (1) и получаемое при анализе течения на устойчивость, часто называют базовым. Устойчивость этого решения, обозначаемого как $\overline{q}$, и подлежит нашему рассмотрению.

На втором этапе рассматривается эволюция возмущений базового решения во времени. Уравнение для возмущений можно получить из нестационарных уравнений Навье – Стокса; они записываются в следующей операторной форме:

$$\frac{\partial q}{\partial t}=-R(q). \tag{2}$$

В ГАУ используется подход, традиционный для линейного анализа устойчивости, который базируется на представлении решения системы уравнений (2) в виде суммы ее стационарного решения $\overline{q}$ и малых возмущений q':

$$q=\overline{q}+q'. \tag{3}$$

Для получения уравнений, линейных относительно q', проводится линеаризация оператора $R(q)$ в окрестности базового решения по этим возмущениям:

$$R(\overline{q}+q')=R(\overline{q})+\frac{\partial R}{\partial q}(\overline{q})q', \tag{4}$$

где $\frac{\partial R}{\partial q}(\overline{q})\equiv J(\overline{q})$ – якобиан уравнений Навье – Стокса (дифференциальный оператор, зависящий от базового решения).

Уравнение относительно малых возмущений получается в результате подстановки разложения (3) в уравнение (2) с учетом уравнений (1) и (4):

$$\frac{\partial q'}{\partial t}+J(\overline{q})q'=0. \tag{5}$$

В силу линейности системы дифференциальных уравнений (5), ее общее решение представляется в виде суммы слагаемых (мод возмущений), каждое из которых также является решением системы (5). Каждую моду можно представить в виде

$$q'(x,y,t)=\hat{q}(x,y)\exp(\omega t), \tag{6}$$

где $\hat{q}$ – комплексный вектор амплитуд возмущения; ω – комплексное число $\omega_r+i\omega_i$, действительная часть которого ω_r – скорость роста/затухания возмущения, а мнимая часть ω_i – его частота (физический смысл имеет только действительная часть соотношения (6)).

Подстановка равенства (6) в систему (5) приводит к задаче на собственные значения для якобиана определяющих уравнений:

$$J\hat{q}=\omega\hat{q}. \tag{7}$$

Численное решение этой задачи проводится на конечно-разностной сетке, поэтому все непрерывные векторы и операторы заменяются своими дискретными приближениями. Дискретизация производных в каждой точке расчетной сетки по заранее известному шаблону численной схемы определяет зависимость этих производных от значений переменных в соседних точках. Таким образом, задача (7) сводится к задаче на собственные значения дискретного приближения якобиана J – матрицы M_{kl}:

$$M_{kl}\hat{\alpha}_l = \omega\hat{\alpha}_k. \tag{8}$$

Здесь вектор $\hat{\alpha}_l$ является дискретизированным полем амплитуды возмущений $\hat{q}$, а дискретизированный якобиан M_{kl} – матрицей производных уравнений по всем переменным во всех точках расчетной сетки, поэтому индексы k и l в уравнении (8) принимают значения от 1 до $N_p \times N_\text{v}$, где N_p – количество узлов расчетной сетки, N_v – количество переменных.

Следует отметить, что в граничных точках расчетной области вместо линеаризации выражения (7) используется линеаризация соответствующих граничных условий, поэтому для этих точек вместо выражения (8) используется уравнение

$$M_{kl}\hat{\alpha}_l = 0. \tag{9}$$

Уравнения (8), (9) можно объединить, если сформулировать обобщенную задачу на собственные значения:

$$M_{kl}\hat{\alpha}_l = \omega T_{km}\hat{\alpha}_m, \tag{10}$$

где T_{km} – диагональная матрица с $T_{ii} = 0$ в граничных точках и $T_{ii} = 1$ во внутренних точках.

Таким образом, определение устойчивости течения в рамках ГАУ сводится к решению обобщенной задачи (10) на собственные значения. Собственные числа матрицы M_{kl} соответствуют различным модам возмущений, причем вещественная часть собственных чисел равна скорости роста возмущений, а мнимая – частоте их колебаний.

Собственные векторы соответствуют пространственным распределениям амплитуд мод. Течение является неустойчивым, если хотя бы одно собственное число имеет положительную вещественную часть (т. е. существует растущая мода возмущений), и устойчивым в противном случае.

Как уже отмечено во введении, в настоящее время используются два различных подхода для определения элементов матрицы M_{kl} во внутренних точках расчетной области. По способу вычисления этой матрицы ГАУ называется соответственно континуальным либо дискретным.

В рамках первого из них (см., например, статью [5]), называемого в работе [10] континуальным, для якобиана J выводится аналитическое выражение, а потом проводится его дискретизация с помощью той или иной численной схемы, которая, вообще говоря, может отличаться от таковой, используемой для решения системы уравнений (1) при получении базового решения.

В отличие от этого, в рамках второго подхода (см., например, работы [11, 12]), называемого в статье [10] дискретным, вычисление якобиана в задаче (7) проводится не на дифференциальном, а на дискретном уровне, т. е. дифференцируется не сам оператор R, а его дискретная форма, используемая для получения базового решения, называемая правой частью системы (2) (*англ.* Right-Hand Side, традиционно обозначаемая как RHS_k); индекс k принимает значения от 1 до $N_p \times N_\text{v}$, как и в уравнении (10).

Дискретная форма якобиана в этом случае есть матрица частных производных RHS_k по переменным α_l (дискретная форма вектора основных переменных q) в каждой внутренней точке расчетной сетки:

$$M_{kl} = \frac{\partial \text{RHS}_k}{\partial \alpha_l}. \tag{11}$$

Существуют два подхода для реализации дифференцирования формы (11). В рамках первого из них для используемой численной схемы необходимо выписать явную зависимость $\text{RHS}_k(\alpha_l)$ и продифференцировать ее аналитически. Несмотря на то, что эта задача весьма трудоемка, особенно для современных схем повышенного порядка точности, она была решена в работе [21], и разработанный подход с успехом применялся в статьях [11, 13, 16, 18].

В данной работе используется альтернативный подход, базирующийся на технологии автоматического дифференцирования (*англ.* Automatic Differentiation (AD)). Несмотря на достаточно давнее появление идеи AD [22], ее активное развитие началось только в последние два десятилетия, в связи с интересом к решению сопряженных задач, связанных прежде всего с оптимизацией формы аэродинамических профилей [23].

Метод AD базируется на том, что алгоритм вычисления любой сложной функции (в том числе и RHS) состоит из последовательного применения элементарных операций φ_i (сложение, умножение, возведение в степень и т. п.):

$$\mathrm{RHS} = \varphi_1 \circ \varphi_2 \circ \ldots \circ \varphi_n. \tag{12}$$

Значения производной от элементарной функции на каждом шаге известны аналитически, поэтому якобиан функции RHS можно вычислить по правилу дифференцирования сложной функции:

$$J = \varphi_1' \circ \varphi_2' \circ \ldots \circ \varphi_n'. \tag{13}$$

Библиотеки, реализующие AD (см., например, работы [24, 25]), накапливают результаты этого дифференцирования в ходе расчета исходной функции и вычисляют дискретизированный якобиан. Важно отметить, что метод AD не является автоматическим в полном смысле этого слова и требует вмешательства в исходный код программы.

В отсутствие газодинамических разрывов, теоретически (т. е. при использовании вычислительных сеток, обеспечивающих получение сеточно-независимых решений для возникающих возмущений), континуальный и дискретный подходы должны обеспечивать одинаковый результат. Однако на практике результаты, полученные с использованием различных подходов на конечных сетках, могут заметно различаться.

Следует отметить, что эволюцию возмущений можно рассматривать не только в рамках ГАУ, но и в рамках прямого численного моделирования нестационарных уравнений Навье – Стокса (2). В таком случае в качестве начального приближения используется решение стационарных уравнений Навье – Стокса (1). Начальные возмущения определяются погрешностью численного решения нестационарных уравнений. Если течение неустойчиво, то в результате расчета наблюдается рост амплитуды возмущений. На линейной стадии, когда наблюдается экспоненциальный характер роста возмущений, их развитие должно быть согласовано с результатами ГАУ при дискретном вычислении якобиана.

В настоящей работе на основе такого сравнения проводилась верификация выполненной нами реализации дискретного подхода к вычислению якобиана.

Постановка задачи устойчивости стационарного обтекания цилиндра и ее вычислительные аспекты

Сравнение результатов двух методов анализа устойчивости проводилось на примере задачи ламинарного обтекания цилиндра совершенным газом, с использованием сеток, последовательно измельчающихся в обоих направлениях. Задача рассматривалась в сжимаемой постановке при числе Маха M = 0,2 и двух значениях числа Рейнольдса, Re = 50 и 60, незначительно превышающих число Рейнольдса потери устойчивости, Re ≈ 47 (см., например, статью [26]), когда число Рейнольдса построено по скорости набегающего потока U_0 и диаметру цилиндра D.

Размер расчетной области составлял $120D$. Такой размер был достаточным, чтобы устранить влияние граничных условий на базовое решение и результаты ГАУ. В этой области была построена серия расчетных сеток *O*-типа (пример такой сетки приведен на рис. 1) с равномерным распределением узлов по угловой координате и сгущением к стенке по радиальной координате (параметры построенных сеток приведены в табл. 1).

В настоящей работе для проведения расчетов использовался конечно-объемный CFD-код “Numerical Turbulence Simulation” (код NTS) [27]. В этом коде для нахождения стационарных решений определяющих уравнений применяется метод установления. Для аппроксимации невязких потоков при расчете сжимаемых течений используется гибридная схема:

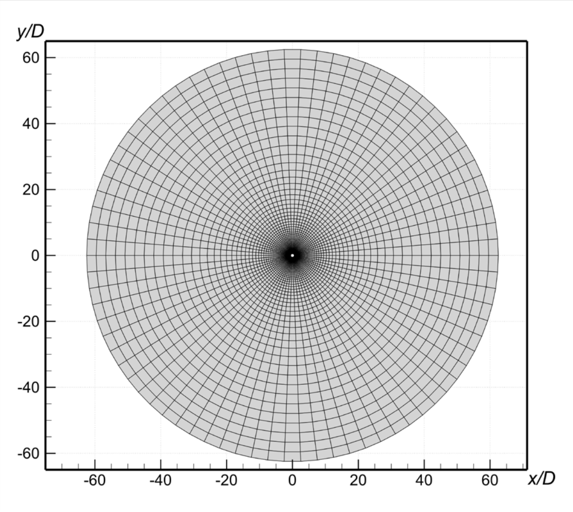


Рис. 1. Пример расчетной сетки *O*-типа (сетка *L*1)

Таблица 1

Параметры использованных расчетных сеток *O*-типа и их значения

Сетка	N_φ	N_r	$\Delta h_1/D$	$\Delta h_{i+1}/\Delta h_i$	$\Delta h_{\max}/D$
*L*1	80		$1{,}0\cdot10^{-2}$	1,098	2
*L*2	160		$5{,}0\cdot10^{-3}$	1,040	2
*L*3	240		$2{,}5\cdot10^{-3}$	1,028	2
*L*4	320		$1{,}0\cdot10^{-3}$	1,023	2
*L*5	800		$1{,}0\cdot10^{-4}$	1,011	1

Обозначения: N_φ, N_r – количество узлов в окружном и радиальном направлениях, соответственно; Δh_i – шаг сетки, $\Delta h_{\max}$ – его максимальное значение; D – диаметр цилиндра.

$$\Delta_H = \alpha_U \Delta_{\text{Roe}} + (1 - \alpha_U)\Delta_{4C}, \tag{14}$$

где α_U – вес противопоточной аппроксимации; Δ_{Roe}, Δ_{4C} – конечно-разностные операторы противопоточной схемы Роу третьего порядка точности и центрально-разностной схемы четвертого порядка точности, соответственно.

Вязкие составляющие потоков аппроксимируются с помощью центрально-разностной схемы второго порядка.

При расчете развития малых возмущений методом решения нестационарных уравнений Навье – Стокса численное интегрирование по времени осуществлялось с помощью неявной схемы Эйлера второго порядка с шагом по времени $\Delta t = 0{,}3\cdot D/U_0$, что обеспечивало значения числа Куранта меньше единицы практически во всей расчетной области и приблизительно 1 тыс. точек на период колебаний дорожки Кармана для всех сеток.

Показатели роста или затухания возмущений и их частота определялись путем обработки зависимостей поперечной скорости от времени, полученных в результате нестационарных расчетов в нескольких точках пространства. При этом выделяли линейный этап развития возмущений, на котором их амплитуда возрастает экспоненциально.

При решении спектральной задачи расчет дискретной формы якобиана осуществлялся обоими методами (дискретным и континуальным). В рамках континуального метода, реализованного ранее в коде NTS, для дискретизации якобиана J использовалась конечно-разностная схема (подробнее она описана в статье [5]), которая представляет собой взвесь противопоточной схемы третьего и центральной схемы четвертого порядков:

$$\Delta_H = \alpha_U \Delta_{3U} + (1 - \alpha_U)\Delta_{4C}, \tag{15}$$

где α_U – вес противопоточной аппроксимации; Δ_{3U}, Δ_{4C} – конечно-разностные операторы противопоточной схемы и центрально-разностной схемы, соответственно.

Чтобы использовать дискретный подход, реализованный нами в настоящей работе, мы применяли метод автоматического дифференцирования (с помощью библиотеки ADF95 [25]). Для численного решения задачи на собственные значения использовали метод Крылова – Шура, который реализован с помощью открытой библиотеки SPEPc/PETSc [28]. Указанный метод предназначен для решения задач на собственные значения с разреженными неэрмитовыми матрицами большого размера (именно к этому типу относится рассматриваемая матрица). Он является модификацией неявно перезапускаемой версии метода Арнольди, который принадлежит классу методов Рэлея – Ритца, основанных на проектировании на подпространство Крылова (см., например, монографию [29]). Метод Крылова – Шура позволяет получать запрашиваемое количество наибольших по модулю собственных чисел и соответствующих им собственных векторов. Поэтому при его использовании исходная матрица предварительно преобразуется таким образом, чтобы наиболее важные с точки зрения устойчивости собственные числа, имеющие наибольшую действительную часть, становились наибольшими по модулю. Это преобразование представляет собой комбинацию сдвига и обращения матрицы (такой подход в англоязычной литературе называют “Shift-Invert Approach” [30]).

Верификация результатов ГАУ, полученных при дискретном подходе к вычислению якобиана

На рис. 2 представлены пространственные распределения возмущений продольной скорости U' при числе Рейнольдса Re = 60 на сетке $L4$, полученные по дискретному ГАУ и прямым численным решением нестационарных уравнений Навье – Стокса. Для последних локальные амплитуды возмущений получены в результате вычитания полей мгновенного и базового решения с нормировкой на максимальное значение $|U'_{\max}|$.

В рамках дискретного ГАУ пространственное распределение возмущений определяется вещественной компонентой собственного вектора, соответствующего наиболее неустойчивому собственному числу. Для сравнения комплексные компоненты векторов E_U, соответствующие возмущениям продольной скорости, были приведены по фазе и амплитуде к значению в точке, где амплитуда возмущений $|U'_{\max}|$ максимальна. Анализ данных на рис. 2 позволяет заключить, что на сетке $L4$ дискретный ГАУ не только правильно предсказывает форму возмущений, развивающихся ввиду неустойчивости, но и обеспечивает хорошее количественное согласие.

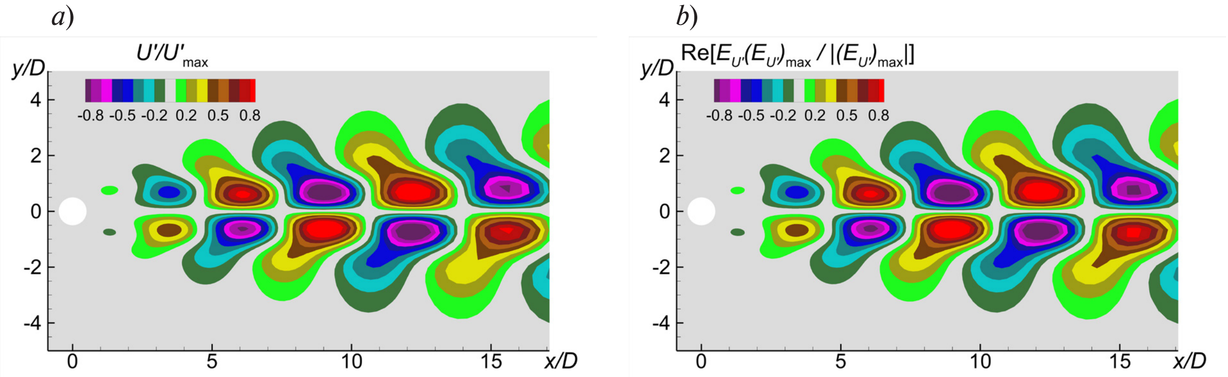


Рис. 2. Пространственные распределения возмущений продольной скорости, полученные на сетке $L4$ прямым численным решением нестационарных уравнений Навье – Стокса (*a*) и с помощью дискретного ГАУ (*b*). Число Рейнольдса Re = 60, число Маха M = 0,2

Таблица 2

Сравнение результатов расчета параметров наиболее неустойчивых возмущений, полученных двумя методами на серии сеток

Сетка	Расчетное значение параметра			
	Показатель роста ω_r		Частота ω_i	
	I	II	I	II
*L*1	0,0132		0,754	0,753
*L*2	0,0389		0,740	0,741
*L*3	0,0420	0,0421	0,738	
*L*4	0,0430	0,0431	0,737	
*L*5	0,0437		0,736	

Обозначения: I – прямое численное решение нестационарных уравнений Навье – Стокса; II – применен ГАУ, дискретный подход.

Примечание. Число Рейнольдса Re = 60, число Маха M = 0,2.

Показатель роста и частота развития наиболее неустойчивых возмущений при Re = 60 на серии сеток *L*1 – *L*5 приведены в табл. 2. Показатель роста и частота, полученные по дискретному подходу, совпадают с высокой точностью (на всех сетках для обтекания ошибка не превышает 0,4 %) с решением нестационарных уравнений Навье – Стокса, что свидетельствует о правильной реализации подхода.

Сравнение результатов двух методов глобального анализа устойчивости

Непосредственное сравнение дискретного и континуального подходов, реализованных в коде NTS, затруднено различиями как в способах вычисления якобиана, так и в численных схемах, используемых для вычисления невязкой части потоков.

В дискретном ГАУ используется такая же вычислительная схема, как и при вычислении базового течения – гибридная схема с противопоточной добавкой Роу. Эта поправка существенно нелинейная, что не позволяет ее использовать в рамках континуального ГАУ, поэтому в нем используется упрощенная линейная противопоточная добавка. Избежать различия схем можно было бы через применение одинаковых центрально-разностных схем, однако на практике это невозможно из-за потери устойчивости при получении базового решения. Тем не менее, если снизить вес противопоточной добавки, то можно кардинально уменьшить различие используемых схем.

Указанная возможность проиллюстрирована рис. 3, где представлена зависимость от шага сетки модуля разности показателей роста $\left|\omega_r^d - \omega_r^c\right|$ в окрестности цилиндра, полученных по результатам дискретного и континуального ГАУ. С уменьшением веса противопоточной добавки эта разность снижается. Далее представлены результаты, полученные с использованием гибридных схем с весом противопоточной добавки α = 0,05.

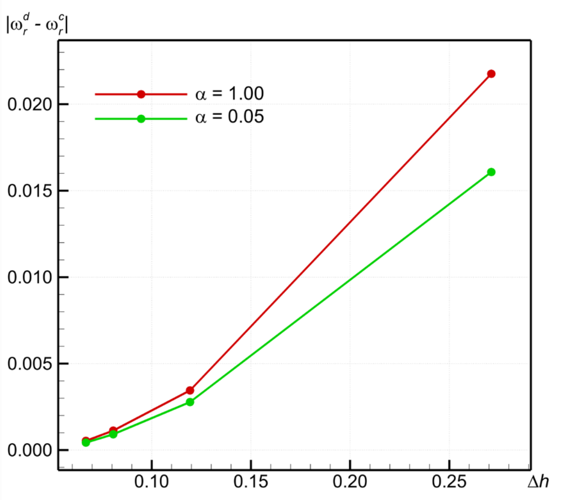


Рис. 3. Влияние шага сетки на разность показателей роста ω_r, рассчитанных по дискретному (*d*) и континуальному (*c*) методам ГАУ.

Использованы гибридные схемы с двумя значениями веса противопоточной добавки α

Таблица 3

Результаты расчета параметров неустойчивой моды возмущений, полученных двумя методами на сетке *L*5 при варьировании числа Рейнольдса, а также сравнение с литературными данными

Метод расчета	Расчетное значение параметра			
	ω_r		ω_i	
	Re = 50	Re = 60	Re = 50	Re = 60
ГАУ, подход дискретный	–0,01099	–0,04368	0,72965	0,73637
континуальный	–0,01093	–0,04372	0,72955	0,73633
[26], ГАУ, дискретный подход	–0,013	–0,047	0,745	0,754
[31], прямое численное решение уравнений Навье – Стокса	–0,012	–0,050	0,750	0,757

На самой мелкой сетке *L*5 показатель роста и частота, полученные с помощью континуального и дискретного подходов (табл. 3), практически совпадают. В этой же таблице приведено сравнение с результатами работ [26, 31], подтверждающее репрезентативность результатов ГАУ.

Для оценки погрешности вычисления показателя роста и частоты неустойчивой моды возмущений на более грубых сетках в качестве «референсного» значения $\omega^{ref} = (\omega_r^{ref}, \omega_i^{ref})$ использовалось среднее арифметическое собственных чисел, полученных с использованием дискретного и континуального подходов на сетке $L5$.

Зависимости погрешности результатов ГАУ

$$\Delta\omega = \frac{(\omega - \omega^{ref})D}{U_0}$$

от характерного шага сетки Δh, определяемого как средний шаг по угловой координате на расстоянии $4D$ от поверхности цилиндра, представлены на рис. 4 и позволяют сделать следующие выводы.

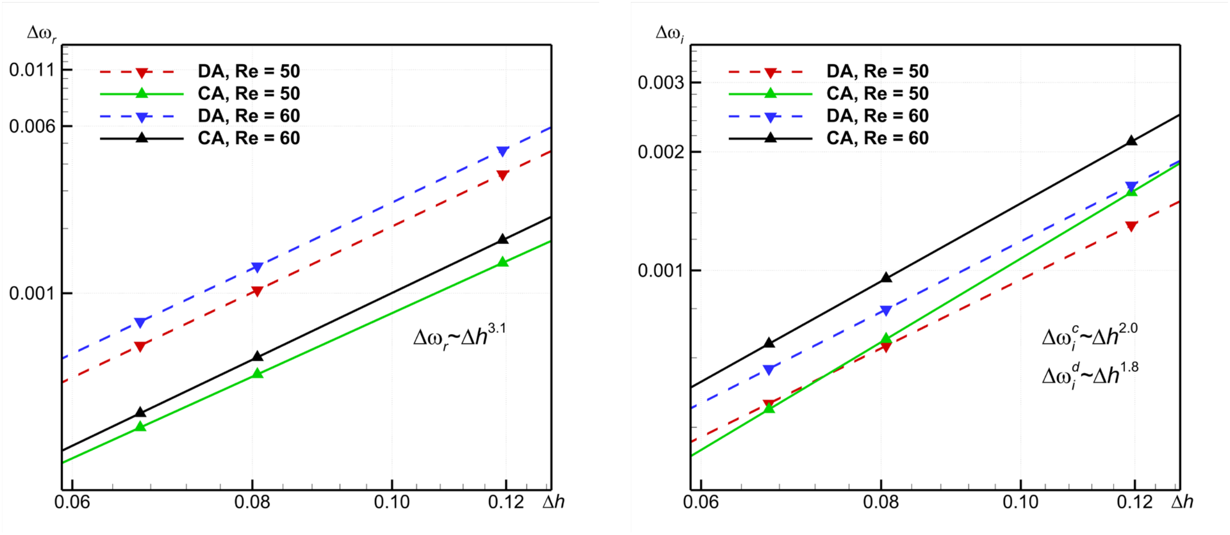

a) *b*)

Рис. 4. Шаговые зависимости погрешностей вычисления показателя роста (*a*) и частоты (*b*). Получены дискретным (DA) и континуальным (CA) методами на сетках $L1 - L4$, при варьировании значения числа Рейнольдса (зависимости даны символами), и их аппроксимация экспоненциальными функциями (прямые в логарифмическом масштабе)

Погрешность расчета практически одинакова для обоих рассмотренных чисел Рейнольдса. Реальный порядок точности ГАУ, который определялся по степенным аппроксимациям зависимости ошибки от шага сетки, оказался примерно одинаковым для обоих методов: его значение составляет примерно 3,1 для скорости роста, а также 1,8 (дискретный ГАУ) и 2,0 (континуальный ГАУ) для частоты. Эти значения согласуются с формальным порядком используемых схем, в которых конвективные слагаемые аппроксимируются по третьему порядку, а вязкие – по второму. Кроме того, следует учитывать, что на неравномерных сетках (а именно такие сетки используются в настоящей работе) реальный порядок схем может снижаться. Анализ данных на рис. 4 также позволяет заключить, что ошибка в предсказании показателя роста оказалась меньше примерно в три раза при использовании континуального подхода, а ошибка в предсказании частоты возмущений – меньше при использовании дискретного подхода.

Заключение

На примере задачи о ламинарном обтекании цилиндра при числах Рейнольдса, близких к критическим, было проведено сравнение двух методов глобального анализа устойчивости (ГАУ), которые различаются способами вычисления якобиана уравнений Навье – Стокса: дискретного (линеаризация этих дискретизированных уравнений) и континуального (дискретизация этих линеаризованных уравнений).

Реализованный нами дискретный подход ГАУ был верифицирован путем сравнения с результатами прямого численного моделирования нестационарного ламинарного обтекания цилиндра при числе Рейнольдса Re = 60. Результаты сравнения продемонстрировали, что показатель роста и частота колебаний наиболее неустойчивой моды совпали с высокой точностью на всех рассмотренных сетках.

При использовании континуального и дискретного методов к вычислению якобиана порядок точности ГАУ оказался одинаковым и соответствовал формальному порядку точности пространственной дискретизации по численным схемам, используемым для получения решения, устойчивость которого исследуется. При этом ошибка предсказания показателя роста возмущений меньше при использовании континуального подхода, а ошибка предсказания частоты колебаний возмущений меньше при использовании дискретного подхода.

Таким образом, можно утверждать, что континуальный и дискретный методы равнозначны по порядку точности и выбор конкретного подхода для проведения анализа устойчивости может определяться другими критериями (простота реализации, вычислительные затраты и др.).

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 22-11-00041). Все расчеты проведены на высокопроизводительном кластере «Торнадо» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (http://www.spbstu.ru).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Бойко А. В., Грек Г. Р., Довгаль А. В., Козлов В. В.** Физические механизмы перехода к турбулентности в открытых течениях. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. 304 с.
2. **Schmid P. J., Henningson D. S.** Stability and transition in shear flows. Book Series “Applied mathematical Sciences”, Vol. 142. New York: Springer, 2001. 556 p.
3. **Theofilis V.** Advances in global linear instability analysis of nonparallel and three-dimensional flows // Progress in Aerospace Sciences. 2003. Vol. 39. No. 4. Pp. 249—315.
4. **Theofilis V.** Global linear instability // Annual Review of Fluid Mechanics. 2011. Vol. 43. Pp. 319—352.
5. **Crouch J. D., Garbaruk A., Magidov D.** Predicting the onset of flow unsteadiness based on global instability // Journal of Computational Physics. 2007. Vol. 224. No. 2. Pp. 924—940.
6. **Crouch J. D., Garbaruk A., Magidov D., Travin A.** Origin of transonic buffet on aerofoils // Journal of Fluid Mechanics. 2009. Vol. 628. 10 June. Pp. 357—369.
7. **Garbaruk A., Crouch J. D.** Quasi-three-dimensional analysis of global instabilities: Onset of vortex shedding behind a wavy cylinder // Journal of Fluid Mechanics. 2011. Vol. 677. 25 June. Pp. 572—588.
8. **Crouch J. D., Garbaruk A., Strelets M.** Global instability in the onset of transonic-wing buffet // Journal of Fluid Mechanics. 2019. Vol. 881. 25 December. Pp. 3—22.
9. **Garbaruk A., Strelets M., Crouch J. D.** Effects of extended laminar flow on wing buffet-onset characteristics // AIAA Journal. 2021. Vol. 59. No. 8. Pp. 2848—2854.
10. **De Pando M. F., Sipp D., Schmid P. J.** Efficient evaluation of the direct and adjoint linearized dynamics from compressible flow solvers // Journal of Computational Physics. 2012. Vol. 231. No. 23. Pp. 7739—7755.
11. **Thormann R., Widhalm M.** Linear-frequency-domain predictions of dynamic-response data for viscous transonic flows // AIAA Journal. 2013. Vol. 51. No. 11. Pp. 2540—2557.
12. **Mettot C., Renac F., Sipp D.** Computation of eigenvalue sensitivity to base flow modifications in a discrete framework: Application to open-loop control // Journal of Computational Physics. 2014. Vol. 269. 15 July. Pp. 234—258.
13. **Xu S., Timme S., Badcock K. J.** Krylov subspace recycling for linearized aerodynamics analysis using DLR-TAU // Proceedings of the International Forum on Aeroelasticity and Structural Dynamics (IFASD 2015). 28 June—2 July, 2015. St. Petersburg, Russia. In 3 volumes. Vol. 2. Pp. 1462—1479.
14. **Sartor F., Metot C., Bur R., Sipp D.** Unsteadiness in transonic shock-wave/boundary-layer interactions: experimental investigation and global stability analysis // Journal of Fluid Mechanics. 2015. Vol. 781. 25 October. Pp. 550—577.

15. **Busquet D., Marquet O., Richez F., Juniper M., Sipp D.** Global stability analysis of turbulent flows around an airfoil near stall // Proceedings of the Eurogen 2017 Conference. September 13–15, 2017. Madrid, Spain. Pp. 1–7.

16. **Timme S.** Global instability of wing shock-buffet onset // Journal of Fluid Mechanics. 2020. Vol. 885. 25 February. P. A37.

17. **Plante F., Dandois J., Beneddine S., Laurendeau E., Sipp D.** Link between subsonic stall and transonic buffet on swept and unswept wings: From global stability analysis to nonlinear dynamics // Journal of Fluid Mechanics. 2021. Vol. 908. 10 February. P. A16.

18. **He W., Timme S.** Triglobal infinite-wing shock-buffet study // Journal of Fluid Mechanics. 2021. Vol. 925. 25 October. P. A27.

19. **Giles M. B., Pierce N. A.** An introduction to the adjoint approach to design // Flow, Turbulence and Combustion. 2000. Vol. 65. No. 3–4. Pp. 393–415.

20. **Peter J. E. V., Dwight R. P.** Numerical sensitivity analysis for aerodynamic optimization: A survey of approaches // Computers & Fluids. 2010. Vol. 39. No. 3. Pp. 373–391.

21. **Dwight R. P.** Efficiency improvements of RANS-based analysis and optimization using implicit and adjoint methods on unstructured grids // Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt – Forschungsberichte. 2006. Nr. 11. S. 1–162.

22. **Wengert R. E.** A simple automatic derivative evaluation program // Communications of the ACM. 1964. Vol. 7. No. 8. Pp. 463–464.

23. **Lyu Z., Kenway G. K. W.** Automatic differentiation adjoint of the Reynolds-averaged Navier–Stokes equations with a turbulence model // Proceedings of the 21st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference. June 24–27, 2013. San Diego (USA), Pp. 1–24.

24. **Hascoët L., Pascual V.** TAPENADE 2.1 user's guide. INRIA Technical Report No. 0300. September, 2004. 78 p. http://www.inria.fr/rrrt/rt-0300.html

25. **Straka C. W.** ADF95: Tool for automatic differentiation of a FORTRAN code designed for large numbers of independent variables // Computer Physics Communications. 2005. Vol. 168. No. 2. Pp. 123–139.

26. **Gianetti F., Luchini P.** Structural sensitivity of the first instability of the cylinder wake // Journal of Fluid Mechanics. 2007. Vol. 581. 25 June. Pp. 167–197.

27. **Shur M. L., Strelets M. K., Travin A. K.** High-order implicit multi-block Navier – Stokes code: Ten-year experience of application to RANS / DES / LES / DNS of turbulence // Proceedings of the 7th Symposium on Overset Grids & Solution Technology. October 5–7, 2004. Huntington Beach, CA, USA. 2004. Pp. 1–52.

28. **Hernandez V., Roman J. E., Vidal V.** SLEPC: A scalable and flexible toolkit for the solution of eigenvalue problems // ACM Transactions of Mathematical Software. 2005. Vol. 31. No. 3. Pp. 351–362.

29. **Голуб Дж., Лоун Ван Ч.** Матричные вычисления. Пер. с англ. Под ред. Воеводина В. В. М.: Мир, 1999. 548 с.

30. **Mack C. J., Schmid P. J.** A preconditioned Krylov technique for global hydrodynamic stability analysis of large-scale compressible flows // Journal of Computational Physics. 2010. Vol. 229. No. 3. Pp. 541–560.

31. **Canuto D., Taira K.** Two-dimensional compressible viscous flow around a circular cylinder // Journal of Fluid Mechanics. 2015. Vol. 785. 25 December. Pp. 349–371.

REFERENCES

1. **Boiko A. V., Dovgal A. V., Grek G. R., Kozlov V. V.,** Physics of transitional shear flows: Instability and laminar-turbulent transition in incompressible near-wall shear layers, Book Ser. "Fluid Mechanics and its Applications", Springer, 2012.

2. **Schmid P. J., Henningson D. S.,** Stability and transition in shear flows, Book Series "Applied Mathematical Sciences", Vol. 142. Springer, New York, 2001.

3. **Theofilis V.,** Advances in global linear instability analysis of nonparallel and three-dimensional flows, Prog. Aerosp. Sci. 39 (4) (2003) 249–315.

4. **Theofilis V.,** Global linear instability, Annu. Rev. Fluid Mech. 43 (2011) 319–352.

5. **Crouch J. D., Garbaruk A., Magidov D.,** Predicting the onset of flow unsteadiness based on global instability, J. Comput. Phys. 224 (2) (2007) 924–940.

6. **Crouch J. D., Garbaruk A., Magidov D., Travin A.,** Origin of transonic buffet on aerofoils, J. Fluid Mech. 628 (10 June) (2009) 357–369.

7. **Garbaruk A., Crouch J. D.,** Quasi-three-dimensional analysis of global instabilities: Onset of vortex shedding behind a wavy cylinder, J. Fluid Mech. 677 (25 June) (2011) 572–588.

8. **Crouch J. D., Garbaruk A., Strelets M.,** Global instability in the onset of transonic-wing buffet, J. Fluid Mech. 881 (25 Dec.) (2019) 3–22.

9. **Garbaruk A., Strelets M., Crouch J. D.,** Effects of extended laminar flow on wing buffet-onset characteristics, AIAA J. 59 (8) (2021) 2848–2854.

10. **De Pando M. F., Sipp D., Schmid P. J.,** Efficient evaluation of the direct and adjoint linearized dynamics from compressible flow solvers, J. Comput. Phys. 231 (23) (2012) 7739–7755.

11. **Thormann R., Widhalm M.,** Linear-frequency-domain predictions of dynamic-response data for viscous transonic flows, AIAA J. 51 (11) (2013) 2540–2557.

12. **Mettot C., Renac F., Sipp D.,** Computation of eigenvalue sensitivity to base flow modifications in a discrete framework: Application to open-loop control, J. Comput. Phys. 269 (15 July) (2014) 234–258.

13. **Xu S., Timme S., Badcock K. J.,** Krylov subspace recycling for linearized aerodynamics analysis using DLR-TAU, Proc. Int. Forum Aeroelasticity Struct. Dyn. (IFASD 2015). 28 June–2 July, 2015. St. Petersburg, Russia. In 3 Vols. 2 (2016) 1462–1479.

14. **Sartor F., Metot C., Bur R., Sipp D.,** Unsteadiness in transonic shock-wave/boundary-layer interactions: experimental investigation and global stability analysis, J. Fluid Mech. 781 (25 Oct.) (2015) 550–577.

15. **Busquet D., Marquet O., Richez F., et al.,** Global stability analysis of turbulent flows around an airfoil near stall, Proc. Eurogen 2017 Conf., Sept. 13–15, 2017, Madrid, Spain. Pp. 1–7.

16. **Timme S.,** Global instability of wing shock-buffet onset, J. Fluid Mech. 885 (25 Febr.) (2020) P. A37.

17. **Plante F., Dandois J., Beneddine S., et al.,** Link between subsonic stall and transonic buffet on swept and unswept wings: From global stability analysis to nonlinear dynamics, J. Fluid Mech. 908 (10 Febr.) (2021) A16.

18. **He W., Timme S.,** Triglobal infinite-wing shock-buffet study, J. Fluid Mech. 925 (25 Oct.) (2021) A27.

19. **Giles M. B., Pierce N. A.,** An introduction to the adjoint approach to design, Flow, Turbul. Combust. 65 (3–4) (2000) 393–415.

20. **Peter J. E. V., Dwight R. P.,** Numerical sensitivity analysis for aerodynamic optimization: A survey of approaches, Comput. Fluids. 39 (3) (2010) 373–391.

21. **Dwight R. P.,** Efficiency improvements of RANS-based analysis and optimization using implicit and adjoint methods on unstructured grids, Dtsch. Zent. für Luft-und Raumfahrt–Forschungsberichte. (11) (2006) 1–162.

22. **Wengert R. E.,** A simple automatic derivative evaluation program, Commun. ACM. 7 (8) (1964) 463–464.

23. **Lyu Z., Kenway G. K. W.,** Automatic differentiation adjoint of the Reynolds-averaged Navier–Stokes equations with a turbulence model, Proc. 21st AIAA Comput. Fluid Dyn. Conf., June 24–27, 2013. San Diego (USA) (2013) 1–24.

24. **Hascoët L., Pascual V.,** TAPENADE 2.1 user's guide, INRIA Tech. Rep. No. 0300. Sept. 2004. 78 p. http://www.inria.fr/rrrt/rt-0300.html.

25. **Straka C. W.,** ADF95: Tool for automatic differentiation of a FORTRAN code designed for large numbers of independent variables, Comput. Phys. Commun. 168 (2) (2005) 123–139.

26. **Gianetti F., Luchini P.,** Structural sensitivity of the first instability of the cylinder wake, J. Fluid Mech. 581 (25 June) (2007) 167–197.

27. **Shur M. L., Strelets M. K., Travin A. K.,** High-order implicit multi-block Navier – Stokes code: Ten-year experience of application to RANS / DES / LES / DNS of turbulence, Proc. 7th Symp. Overset Grids Solut. Technol. Oct. 5–7, 2004. Huntington Beach, CA, USA (2004) 1–52.

28. **Hernandez V., Roman J. E., Vidal V.,** SLEPC: A scalable and flexible toolkit for the solution of eigenvalue problems, ACM Trans. Math. Softw. 31 (3) (2005) 351–362.

29. **Golub G. H., van Loan C. F.,** Matrix computations, 3-rd Ed., John Hopkins University Press, Baltimore, Maryland, USA,1996.

30. **Mack C. J., Schmid P. J.,** A preconditioned Krylov technique for global hydrodynamic stability analysis of large-scale compressible flows, J. Comput. Phys. 229 (3) (2010) 541–560.

31. **Canuto D., Taira K.,** Two-dimensional compressible viscous flow around a circular cylinder, J. Fluid Mech. 785 (25 Dec.) (2015) 349–371.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛУБКОВ Валентин Денисович – *инженер лаборатории «Вычислительная гидроакустика и турбулентность» Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
golubkovvd@gmail.com
ORCID: 0000-0001-9473-7430

ГАРБАРУК Андрей Викторович – *доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории «Вычислительная гидроакустика и турбулентность» Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
agarbaruk@mail.ru
ORCID: 0000-0002-2775-9864

THE AUTHORS

GOLUBKOV Valentin D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
golubkovvd@gmail.com
ORCID: 0000-0001-9473-7430

GARBARUK Andrey V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
agarbaruk@mail.ru
ORCID: 0000-0002-2775-9864

Статья поступила в редакцию 20.12.2022. Одобрена после рецензирования 26.09.2023. Принята 26.09.2023.
Received 20.12.2022. Approved after reviewing 26.09.2023. Accepted 26.09.2023.

Научная статья
УДК 533.17
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16406

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЕРХЗВУКОВОГО СОПЛА ИНЖЕКТОРА МАССИВНОЙ ГЕЛИЕВОЙ СТРУИ

В. М. Тимохин ✉, Д. Д. Коробко, Л. И. Нуртдинова,
В. Г. Капралов, В. Ю. Сергеев
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ v.timokhin@spbstu.ru

Аннотация. В работе описана конструкция и принцип действия клапана, предназначенного для испытаний прототипов ключевых элементов системы массивной газовой инжекции: седла и сверхзвукового сопла. Приведены результаты расчетов параметров сверхзвукового сопла, близких к оптимальным для выбранной конструкции клапана. Выполнено моделирование газовых потоков через седло и сопло, рассчитаны параметры формируемой струи на выходе системы инжекции в ближнем поле сопла. Обоснован выбор «ступенчатой» формы профиля сопла для первых испытаний. Сделана оценка требований к точности изготовления прототипов сопел.

Ключевые слова: численное моделирование, магнитное удержание, высокотемпературная плазма, газовая струя, выключение разряда

Финансирование. Работа поддержана госкорпорацией «Росатом» и Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Федерального проекта 3 (U3), № FSEG-2023-0018 «Разработка и создание систем струйной и пеллет инжекции с повышенными производительностью и ресурсом».

Для цитирования: Тимохин В. М., Коробко Д. Д., Нуртдинова Л. И., Капралов В. Г., Сергеев В. Ю. Моделирование сверхзвукового сопла инжектора массивной гелиевой струи // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 63–75. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16406

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16406

SIMULATION OF A SUPERSONIC NOZZLE OF A MASSIVE HELIUM JET INJECTOR

V. M. Timokhin ✉, D. D. Korobko, L. I. Nurtdinova,
V. G. Kapralov, V. Yu. Sergeev
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ v.timokhin@spbstu.ru

Abstract. The paper describes the design and operating principle of a valve designed for testing the prototypes of key elements of a massive gas injection system: a seat and a supersonic nozzle. The calculation results for supersonic nozzle parameters close to optimal for the selected valve design have been presented. The simulation of gas flows through the seat and nozzle was carried out, the parameters of the formed jet at the injection system outlet in the nozzle near field were calculated. The choice of the "stepped" nozzle profile for the first tests was justified. An assessment was made of the requirements for the accuracy of manufacturing prototype nozzles.

Keywords: numerical simulation, magnetic confinement, high-temperature plasma, gas jets, discharge shutdown

Funding: The research was supported by "ROSATOM" State Corporation and the Ministry of Science and Higher Education of Russian Federation within the framework of the Federal Project 3 (U3) "Development and Creation of Jet & Pellet Injection Systems with Increased Performance and Resource" (No. FSEG-2023-0018).

For citation: Timokhin V. M., Korobko D. D., Nurtdinova L. I., Kapralov V. G., Sergeev V. Yu., Simulation of a supersonic nozzle of a massive helium jet injector, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 63–75. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16406

Введение

Одной из принципиальных задач при создании термоядерной энергетики является недопущение либо существенное снижение вероятности срыва разряда токамака. Эта проблема пока полностью не решена, она находится только в процессе решения [1].

Изложим кратко ее суть. Если срыв тока разряда неизбежен, то в качестве крайней меры должны быть приняты быстрые действия по смягчению последствий, чтобы снизить вероятность значительного повреждения вакуумной камеры и других элементов конструкции токамака-реактора. Поскольку тепловая и магнитная энергия плазмы эффективно сохраняется в объеме камеры во время срыва, ее можно только перераспределить внутри камеры, но нельзя удалить. Этого перераспределения можно достичь, например, путем введения достаточно большого количества примесей. В качестве такой примеси используется, как правило, группа благородных газов (гелий, неон и аргон), которая предназначена для генерации изотропного излучения энергии плазмы на первую стенку и нацелена на предотвращение концентрированной нагрузки.

Наиболее распространенной технологией инжекции, применяемой для быстрой доставки примесей, служит массивная газовая инжекция (МГИ). Один из прототипов МГИ описан в следующем разделе этой статьи.

Важным элементом системы МГИ является сверхзвуковое сопло Лаваля, которое обеспечивает формирование струи инжектируемой примеси в вакуумную камеру токамака [2]. Параметры сопла определяют скорость и распределение инжектируемого газа, что влияет на глубину проникновения примеси и задает распределение источника излучения внутри плазменного шнура. На докритическом (сужающемся) участке сопла движение газа происходит с дозвуковыми скоростями. В критическом (самом узком) сечении сопла локальная скорость газа достигает звуковой, а на закритическом (расширяющемся) участке газовый поток движется со сверхзвуковыми скоростями. Внутренняя энергия газа преобразуется в кинетическую энергию его направленного движения. Кроме того, газ, проходя через сопло на значительной скорости, не успевает передать его стенкам заметное количество своей тепловой энергии. Эта особенность процесса позволяет считать его адиабатическим, что существенно упрощает его моделирование.

В задачи данной работы входило моделирование процесса истечения массивной струи газа из системы МГИ для различных видов сопла и выбор его оптимального вида.

Критерием эффективности сопла служит достижение максимальной скорости газа при минимальном угле разлета струи на выходе сопла (это позволяет увеличить глубину проникновения инжектируемого газа в плазму).

Другим важным критерием для выбора прототипа сопла служит простота технологии его изготовления. Малые размеры критического сечения и сложная форма профиля сопла требуют привлечения лазерных и гальванопластических технологий. Возможность изготовления сопла без сложных процедур металлообработки создает существенное преимущество при сопоставимых параметрах струи, формируемой соплом.

Моделирование было выполнено в поддержку стендовых испытаний прототипа клапана для массивной инжекции газа и не предполагало изменений параметров потоков газа и геометрии сопла в широких пределах.

Основная цель расчетов состояла в поисках оптимального распределения параметров потока газа в ближнем поле на выходе сопла. Оптимальные значения набора параметров необходимы для проектирования диагностики стенда системы МГИ, а также для моделирования взаимодействия газовых струй с высокотемпературной плазмой установок с магнитным удержанием.

Изложение полученных результатов построено следующим образом. Сначала описан принцип действия и устройство газового клапана, предназначенного для формирования сверхзвуковой струи. Затем представлены результаты расчетов основных параметров сверхзвукового сопла. Далее приведено описание алгоритма построения расчетной сетки и результатов, полученных в ходе моделирования, а также представлен анализ процесса истечения газа через сверхзвуковое сопло. В заключение сформулированы основные выводы работы.

Газовый клапан для испытаний прототипов седла и сопла

Метод МГИ относительно прост в реализации, но имеет тенденцию к формированию локального источника излучения примеси в периферийных областях плазмы, что может вести к низкой эффективности ввода примеси в центральные области плазменного шнура [3]. Позиционирование клапана МГИ, согласно оригинальному дизайну [4], позволяет приближать его к плазме, что увеличивает эффективность ввода примеси. Основная идея дизайна – обеспечить подвижность клапана на значительном расстоянии от привода, что позволяет перемещать выходной срез сопла клапана вплоть до последней замкнутой магнитной поверхности (*англ.* Last Closed Magnetic Surface (LCMS)). Система подачи клапана обеспечивает его перемещение от положения за пределами шибера патрубка установки до положения рядом с LCMS. Перемещение сопла может достигать расстояния более метра, что обычно превышает размеры нейтронной защиты установок с нейтронами, включая токамак-реактор ИТЭР (первое название – международный экспериментальный термоядерный реактор, *англ.* International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER)). Такое перемещение может быть достаточно быстрым, что открывает перспективы использования такого варианта МГИ в радиационной обстановке токамака-реактора. Это избавляет от использования направляющих трубок для доставки струи от сопла клапана до плазмы, сокращает время срабатывания системы, уменьшает угловое расширение газовой струи.

Задаются следующие расчетные характеристики инжектора массивной газовой струи гелия:

поток газа – не менее 10^{23} ат/с (в максимуме);

общее число инжектируемых частиц – не менее $5{\cdot}10^{23}$;

время срабатывания системы (появление газа на выходе сопла после получения сигнала запуска от системы предсказания срыва тока разряда) – не более 3 мс;

время доставки газа от выхода сопла до плазмы – менее 1 мс (при расположении сопла на расстоянии менее 10 см от LCMS.

С целью экспериментальных исследований процессов формирования газовой струи был разработан специальный клапан, обеспечивающий относительно легкий доступ к соплу, а также к седлу – элементу конструкции, предназначенному для надежной фиксации сопла и перекрытия газового потока.

На рис. 1 показан общий вид клапана для испытаний прототипов седла и сопла. В клапан можно независимо устанавливать как сменное седло *4*, так и сменное сопло *2*. Клапан допускает работу с давлениями газа до нескольких десятков атмосфер. Выходной патрубок *1* обеспечивает его подключение к вакуумной схеме стенда через порт с грибковым типом уплотнения, которое используется для установки вакуумметрических датчиков типа ПМТ-6М.

Конструкция клапана включает электромагнит, магнитная цепь которого состоит из якоря *6*, стопа *10* и набора магнитопроводов. Рабочий зазор магнитной цепи располагается между якорем и стопом. На нержавеющей трубке *8*, в которую впаян стоп, установлена катушка электромагнита *9*. Катушка подключается к внешнему импульсному источнику

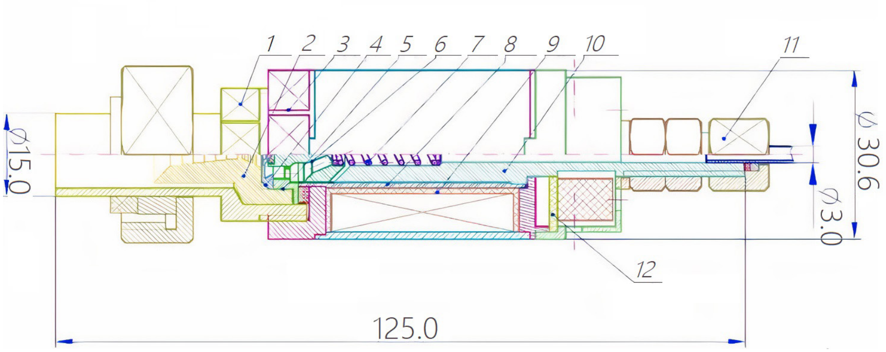


Рис. 1. Схема газового клапана для испытаний прототипов седла и сопла:
1 – выходной патрубок, *2* – сменное сопло, *3* – нижний магнитопровод, *4* – сменное седло, *5* – сепаратор, *6* – якорь с тарелкой, *7* – пружина, *8* – разделительная нержавеющая трубка, *9* – катушка электромагнита, *10* – стоп, *11* – входная газовая магистраль, *12* – печатная плата

питания через клеммы, установленные на печатной плате *12*. К входному штуцеру стопа подключается внешняя газовая магистраль *11* для подачи рабочего газа в клапан. Внутри стопа и якоря располагается пружина *7*, обеспечивающая закрывание клапана по окончании электрического импульса.

Принцип работы газового клапана следующий. Рабочий газ поступает из входной магистрали во внутренний канал стопа, затем через каналы в якоре поступает в окружающий якорь объем внутри нержавеющей трубки и через сепаратор *5* подается к сменному седлу *4*, канал которого закрыт тарелкой якоря *6* клапана. При срабатывании электромагнита тарелка клапана отходит от седла и газ сквозь седло проходит в сменное сопло *2*, в котором и формируется сверхзвуковая газовая струя, истекающая через патрубок *1* в вакуумный объем, на котором установлен клапан. Для замены седла и/или сопла достаточно, отключив газовую магистраль и напустив атмосферу в вакуумный объем, отвинтить выходной патрубок от нижнего магнитопровода *3*. После этого можно вставить новые седло и сопло, заменив уплотнения (при необходимости).

Рабочий цикл применения клапана включает следующую последовательность действий.

На этапе подготовки клапана к работе необходимо подключить его к импульсному источнику питания и проверить срабатывание электромагнита клапана.

Следующим шагом надо подсоединить входную газовую магистраль *11* и откачать ее и внутренний объем клапана, состоящий из каналов в стопе *10*, якоря *6* и сепаратора *5*, для удаления рабочего газа и воздуха, заполнявших магистраль и внутренний объем клапана до начала работы.

После откачки следует заполнить входную газовую магистраль и входной внутренний объем клапана новым рабочим газом.

Затем, с соблюдением мер безопасности, следует проверить срабатывание клапана уже с рабочим газом и его выхлопом в атмосферу.

Далее клапан устанавливается на вакуумный объем, в который будет импульсно напускаться рабочий газ, и необходимо выполнить откачку вакуумного объема.

В процессе работы импульсный источник питания разряжает конденсаторную батарею на катушку *9* электромагнита клапана. В результате формируется магнитный поток через цепь магнитопроводов, стоп *10* и якорь *6*. Якорь притягивается к стопу и отрывает тарелку от седла *4*. На выходе седла формируется передний фронт газового потока, который проходит сквозь сменное сопло *2*, где формируется сверхзвуковая газовая струя.

Расчет параметров и оптимизация газовых потоков, формируемых этими элементами конструкции, составляет предмет данной работы. По мере разряда батареи источника, магнитное поле в электромагните ослабевает и клапан закрывается пружиной *7*, что формирует задний срез газового импульса и завершает рабочий цикл клапана.

Расчет параметров сверхзвукового сопла для МГИ

Расчет параметров сопла Лаваля был выполнен с помощью методов и формул для одномерных стационарных течений идеального газа в каналах [5, 6]. Был рассчитан вариант сопла Лаваля конического профиля, взятый за основу при изготовлении прототипов сопла и седла. При этом использовались известные газодинамические соотношения и законы сохранения:

$$\frac{T}{T_0}=1-\frac{\gamma-1}{\gamma+1}\lambda^2, \tag{1}$$

$$\frac{\rho}{\rho_0}=\left(1-\frac{\gamma-1}{\gamma+1}\lambda^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}, \tag{2}$$

$$\frac{p}{p_0}=\left(1-\frac{\gamma-1}{\gamma+1}\lambda^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}, \tag{3}$$

где p_0, ρ_0, T_0 – давление, плотность и температура покоящегося газа; γ – показатель адиабаты; λ – приведенная скорость,

$$\lambda=\frac{v}{c_{S*}}=\frac{v}{\sqrt{\frac{2\gamma R}{(\gamma+1)M}T_0}}$$

(c_{S*} – скорость звука при критических значениях параметров ρ_*, T_*, p_*).

Параметры ρ_*, T_*, p_* следуют выражениям:

$$T_*=\frac{2}{\gamma+1}T_0,\ \rho_*=\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}\rho_0,\ p_*=\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}p_0.$$

Параметры газа должны принимать свои экстремальные значения в самом узком сечении сопла Лаваля, называемом «критическим сечением». Проектируемое сопло должно обеспечивать массовый поток гелия G = 3,8·10^{-4} кг/с. В соответствии с законом сохранения потока и заданными значениями давления, температуры и потока на входе сопла, определяется диаметр критического сечения:

$$d_{crit}=2\sqrt{\frac{G\sqrt{T_0}}{B\pi p_0}}, \tag{4}$$

где $B=\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}\sqrt{\gamma\frac{m_{\text{He}}}{R}}=0{,}016\frac{\text{K}^{0,5}\cdot\text{c}}{\text{м}}.$

В данном расчете для гелия получаем значение d_{crit} = 0,73 мм.

При проектировании конического сопла необходимо также правильно выбрать угол раствора дозвуковой и сверхзвуковой частей сопла [7 – 9]. Рекомендуемые значения угла β раствора сверхзвуковой части сопла в конических соплах не должны превышать 15° [9].

Для представленных ниже расчетов были выбраны углы дозвуковой и сверхзвуковой частей сопла (α и β, соответственно: α = 26°, β = 12°), что определило значения длины этих частей как 10 и 20 мм соответственно.

При вычислении диаметра выходного сечения обычно обращаются к газодинамической функции приведенного расхода:

$$q(\lambda)=\frac{\rho v}{\rho_* c_{S*}}=\left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}\lambda\frac{\rho}{\rho_0}=\left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}\lambda\left(1-\frac{\gamma-1}{\gamma+1}\lambda^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}. \tag{5}$$

Из условия сохранения потоков при стационарном течении следует, что

$$\rho_2 v_2 S_2=\rho_* c_{S*}S_{crit}\rightarrow S_2=\frac{\rho_* c_{S*}}{\rho_2 v_2}S_{crit}=\frac{S_{crit}}{q(\lambda_2)}, \tag{6}$$

а сечение на выходе сопла выражается как

$$d_2 = d_{crit}\sqrt{\frac{1}{q(\lambda_2)}}. \qquad (7)$$

В рассматриваемом случае диаметр выходного сечения d_2 = 4 мм был задан конструкционными параметрами клапана (см. рис. 1). Поэтому значение газодинамической функции приведенного расхода, найденное из равенств (5), позволяет получить значение приведенной скорости λ_2 и скорости v_2, реализующейся на выходе сопла:

$$q(\lambda_2) = \left(\frac{d_{crit}}{d_2}\right)^2 = 0{,}014 \rightarrow \lambda_2 = 1{,}97 \rightarrow v_2 = c_{S^*}\lambda_2 = 1{,}74\,\text{км/с}. \qquad (8)$$

Результаты моделирования

Рассчитанный вышеописанным способом конический профиль сопла Лаваля имел следующие параметры:

диаметр входного сечения d_1 = 4,0 мм;
диаметр критического сечения d_{crit} = 0,7 мм;
диаметр сечения выхода d_2 = 4,0 мм;
длина сверхзвуковой части сопла l_2 = 20 мм;
полный угол раствора стенок β = 12°;
длина дозвуковой части l_1 = 10 мм;
полный угол раствора стенок α = 26°.

Для первых экспериментов с прототипом клапана МГИ была выбрана геометрия конического сопла с этими параметрами, упрощенная для изготовления. Было спроектировано сопло со ступенчатыми дозвуковой и сверхзвуковой частями, близкое к коническому профилю, которое технологически можно изготавливать методом последовательного сверления заготовки (далее для краткости употребляется термин «ступенчатое сопло»). Для обеих частей сопла было задано по 7 ступеней. Шаг по диаметру ступеней был выбран равным 0,5 мм, шаг по длине – 1,4 мм для дозвуковой части и 2,8 мм – для сверхзвуковой. Перед входной частью сопла было установлено седло цилиндрической формы, с длиной, равной диаметру входного сечения, – 4 мм, необходимое для запирания газового потока и фиксации данного элемента в конструкции клапана.

Эскиз сопла с седлом и примером построенной расчетной сетки для моделирования изображен на рис. 2. Расчетная область была разделена на две зоны. В области сопла и седла, где параметры потока газа меняются быстрее, была построена более мелкая сетка, размер элемента которой составил 0,05 мм; в основном объеме, в пристеночной области, для улучшения разрешения пограничного слоя, размер сеточной ячейки был уменьшен до 0,01 мм для 10 ячеек, прилегающих к стенке. В области диагностической камеры, куда происходит инжекция струи, размер элемента сетки составил 0,15 мм.

В данном разделе представлены результаты численного моделирования потока гелия через такое сопло. Подобное разделение, с теми же характерными размерами элемента сетки, применялось и в расчетах с другими профилями сопла (их основные результаты приведены в следующем разделе).

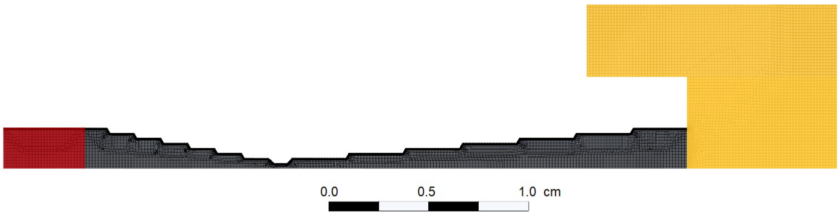


Рис. 2. Пример расчетной сетки для ступенчатого сопла Лаваля с седлом (последнее выделено красным цветом).
Показана область диагностической камеры (выделена желтым цветом)

Моделирование было выполнено с помощью CFD-пакета ANSYS Fluent, где численно решалась стационарная система из уравнений непрерывности и баланса импульса. Решалась осесимметричная задача с использованием неявной схемы интегрирования, со вторым порядком аппроксимации. В расчет была включена модель турбулентности k-ε Realizable [10]. При решении задачи были установлены следующие граничные условия:

давление на входе сопла .... 10 атм (1 МПа);
давление на выходе сопла .... 1 Па;
температура на входе и выходе сопла ... 300 K;
стенки считались без скольжения и без шероховатостей.

Выбор методики расчета был основан на следующих соображениях. Оценка числа Кнудсена при заданных параметрах задачи дает значения, не превышающие $2\cdot10^{-3}$ внутри сопла и $3\cdot10^{-2}$ на расстоянии 5 см от сопла, что позволяет применять с разумной точностью континуальный подход для данной задачи на не слишком больших расстояниях от среза сопла. Конструкция клапана предполагает его размещение в непосредственной близости от плазмы, на расстоянии не более 10 см от последней замкнутой магнитной поверхности установки, что позволяет ожидать высокую степень достоверности полученных расчетных результатов.

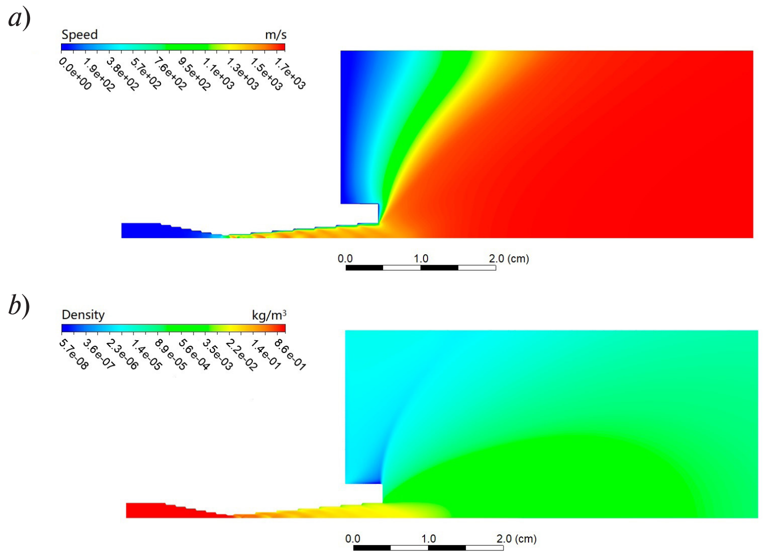


Рис. 3. Расчетные распределения скорости (*a*) и плотности (*b*) гелиевой струи при стационарном истечении из ступенчатого сопла с седлом

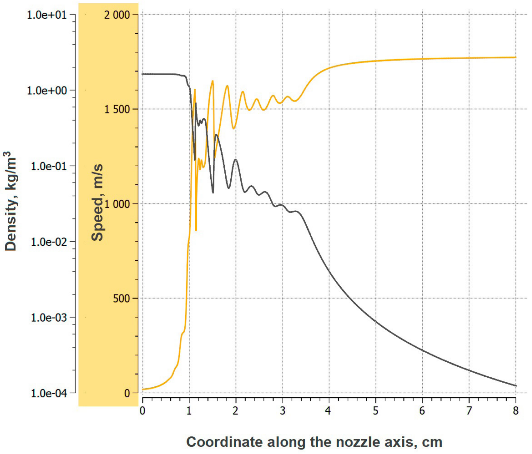


Рис. 4. Распределение скорости (кривая желтого цвета) и плотности (кривая черного цвета) струи вдоль оси инжекции для ступенчатого сопла с седлом

На рис. 3 представлены расчетные распределения скорости и плотности для ступенчатого прототипа сопла Лаваля после установления стационарного течения. Внутри сверхзвуковой части сопла можно заметить периодические скачки параметров газа, возникающие в результате отражения ударных волн от ступенек внутри сопла. Такой характер истечения газа может приводить к турбулентному режиму течения газа внутри сопла и сказываться на его производительности.

Логично предположить, что увеличение количества ступенек в профиле сопла вызовет уменьшение амплитуды данных скачков и, соответственно, установление более равномерного характера течения газа внутри сопла. Риск перехода в турбулентный режим течения газа в таком случае будет снижен. Следует отметить, что на выходе сопла с таким профилем из 7 ступенек получается струя с равномерными выходными профилями скорости и плотности потока газа, а расходимость струи – не велика.

Распределения скорости и плотности вдоль оси инжекции струи показаны на рис. 4. На них можно отчетливее наблюдать характер скачков параметров потока вдоль оси инжекции внутри сопла. Амплитуда колебаний по плотности не превышает 80 % от максимального значения, а по скорости потока она составляет около 40 %. Максимальные колебания локализованы вблизи критического сечения сверхзвуковой части сопла. По мере приближения к выходу сопла амплитуда колебаний снижается.

Несмотря на особенности распределений параметров течения газа внутри ступенчатого сопла, общая картина распределения параметров струи за соплом остается такой же, как у обычного конического сопла, за исключением несколько большего угла разлета газа. Скорость непосредственно на выходе сопла уменьшается примерно до 1,5 км/с, но струя в диагностической камере разгоняется до значений скорости $v_{\max}$ = 1,7 км/с, что близко к теоретически максимальному (см. равенства (8)). Давление на выходном срезе сопла при заданных параметрах задачи составляет величину порядка 800 Па, что приводит к существенно недорасширенному режиму истечения струи [11]. Характерные размеры висячего скачка уплотнения, полученные из эмпирических формул [12], составляют около 10 см и сопоставимы с размерами диагностической камеры, что вполне соответствует расчетной картине истечения. Исследования крупномасштабной структуры струи лежат за рамками данной работы. Результаты расчетов для сопел с другими профилями, в том числе и гладкого конического, приводятся в следующем разделе работы.

Оптимизация профиля сопла

Коническая форма сопла является предельной для сопла со ступенчатым профилем, при увеличении количества ступенек до бесконечности. Параболическое сопло теоретически должно давать оптимальные значения скорости и угла разлета газа на выходе [7]. Расчетная сетка для параболического сопла строилась следующим образом: размеры входного, выходного и критического сечения полагались такими же, как и при проектировании конического сопла (для сохранения массового расхода), а формы профилей дозвуковой и сверхзвуковой частей имели вид параболы вдоль оси сопла. В области критического сечения производилось «сшивание» формы профилей дозвуковой и сверхзвуковой частей, с помощью метода устремления к нулю первой производной формы профиля сопла вдоль его оси. В ином случае образуется излом профиля сопла, что может приводить к возникновению ударных волн в этой его области.

Для сравнения угла разлета для трех видов сопла оценивалась полуширина струи. Рассчитывалось распределение плотности струи в плоскости, поперечной оси инжекции струи, на расстоянии 3 см от выходного среза сопла. Далее определялось расстояние от оси инжекции, на котором плотность газа падает вдвое относительно своего максимального значения, что и определяет полуширину струи, характеризующую масштаб разлета газа на выходе сопла.

Распределения плотности вдоль поперечного сечения струи для трех видов сопла, для которых проводились расчеты, приведены на рис. 5, а основные характеристики струи в диагностической камере приведены в таблице. Полученные результаты указывают на наименьший разлет гелиевой струи и наибольшую ее скорость на выходе для гладкого конического сопла. Параболическая форма сечения сопла дает промежуточные значения скорости и ширины, что, по-видимому, связано с неоптимальным выбором профиля такого вида сопла при заданных значениях сечений.

Подбор оптимального профиля сопла с параболическим сечением представляет собой сложную вариативную задачу, решение которой выходит за рамки данного исследования. Ступенчатое сопло дает менее, чем 10%-е снижение скорости струи на выходе и приводит к увеличению угла разлета струи примерно вдвое, по сравнению с коническим профилем сопла. Такое ухудшение параметров струи допустимо и вполне компенсируется технологической простотой его изготовления.

Анализ рис. 5 позволяет заключить, что распределения плотности струи в поперечном сечении – монотонные, с максимумами на оси инжекции для всех типов сопла. Абсолютное значение плотности на оси инжекции для ступенчатого сопла падает в 4 раза относительно конического. Заметно также существенное увеличение угла разлета струи для случая ступенчатого сопла.

В ходе моделирования было также проведено варьирование диаметра критического сечения для ступенчатого сопла с целью оценки влияния точности изготовления сопла на параметры формируемой струи. Расчетная сетка соответствовала представленной на рис. 2, с точностью до диаметра критического сечения, который задавался равным ±0,2 мм от расчетного оптимального значения 0,7 мм (получено по формуле (4)). В результате были рассчитаны распределения скорости и плотности газа на выходе из сопла. Основные параметры струи сведены в ту же самую таблицу.

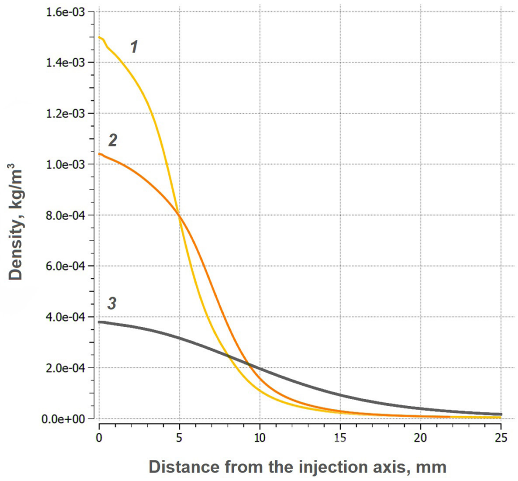


Рис. 5. Распределения плотности гелиевой струи вдоль ее поперечного сечения для трех видов сопла на расстоянии 3 см от среза выходного сечения. Расчет проведен для конической (кривая *1*), параболической (*2*) и ступенчатой (*3*) форм сечения сопла

Таблица

Рассчитанные значения ключевых параметров работы сопла

Вид сопла	Скорость струи на выходе, м/с	Полуширина струи, мм	Массовый поток, г/с
Коническое	1715	5,0	0,32
Параболическое	1666	7,0	0,32
Ступенчатое.................обычное	1551	10,3	0,32
................с седлом	1549	11,0	0,32
...с увеличенным до 0,9 мм критическим сечением	1551	10,6	0,55
...с уменьшенным до 0,5 мм	1531	10,9	0,17

Таким образом, при увеличении диаметра критического сечения до 0,9 мм было получено повышение массового расхода газа в 1,7 раза. При уменьшении этого диаметра до 0,5 мм массовый расход снизился в 1,9 раза. Также расчеты показывают, что скорость струи в диагностической камере несущественно зависит от типа сопла, в то время как наименьший угол разлета струи получен для обычного ступенчатого сопла. Падение скорости на выходе сопла и уширение профиля струи в случае варьирования площади критического сечения не превышают нескольких процентов. Однако значительное изменение массового расхода газа при варьировании площади критического сечения указывает на необходимость соблюдения высокой точности размеров при изготовлении профиля ступенчатого сопла (допуск по диаметру должен быть не хуже 0,01 мм).

Заключение

В работе были рассчитаны оптимальные параметры сверхзвукового сопла для заданного массового расхода гелия $3{,}8 \cdot 10^{-4}$ кг/с. Диаметры входного и выходного сечений составили 4 мм, диаметр критического сечения – 0,7 мм, значения длины дозвуковой и сверхзвуковой частей сопла составили 10 и 20 мм, соответственно; полный угол раствора стенок для дозвуковой части составил 26°, для сверхзвуковой – 12°. Было промоделировано истечение газа через сопла различного профиля в диагностическую камеру с помощью CFD-пакета среды ANSYS Fluent. Были детально рассчитаны параметры потока газа через ступенчатое сопло с седлом в ближнем поле струи. Было установлено, что такое сопло позволяет получать скорость потока газа около 1550 м/с на оси инжекции, с полушириной разлета струи 11 мм на расстоянии 3 см от выходного среза сопла.

Моделирование подтвердило, что ступенчатое сопло с седлом дает несущественную разницу в значениях скорости и полуширины струи, по сравнению с соплом без седла. При заданных значениях сечений максимальную скорость на выходе и минимальный угол разлета струи можно достичь у сопла с конической формой профиля, ступенчатое же сопло с седлом показывает снижение качества не более10 % по параметру скорости струи на выходе, а по параметру полуширины струи – снижение примерно в 3 раза, что вполне приемлемо, если учитывать технологическую простоту его изготовления.

Таким образом, оптимальным вариантом следует считать проектирование и изготовление ступенчатого сопла с седлом для его использования в первых экспериментах с прототипом клапана МГИ на установках с магнитным удержанием плазмы.

В ходе моделирования было предпринято варьирование площади критического сечения ступенчатого сопла с седлом. Результаты расчетов показали сильную зависимость массового расхода от критического сечения сопла; при этом скорость и полуширина струи на выходе изменялись незначительно.

В целом, проведенное исследование указывает на высокие требования к точности изготовления профилей сопел. Допуски диаметров профиля сопла должны задаваться с точностью не хуже квалитета 10.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Eidietis N. W.** Prospects for disruption handling in a tokamak-based fusion reactor // Fusion Science and Technology. 2021. Vol. 77. No. 7–8. Pp. 738–744.

2. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теоретическая физика. В 10 тт. Т. 6. Гидродинамика (§ 97. Истечение газа через сопло). М.: Физматлит, 2021. 728 с.

3. **Hollmann E. M., Aleynikov P. B., Fülöp T., et al.** Status of research toward the ITER disruption mitigation system // Physics of Plasmas. 2015. Vol. 22. No. 2. P. 021802.

4. **Дремин М. М., Капралов В. Г., Кислов А. Я. и др.** Влияние напуска благородных газов на срыв разряда в токамаке Т-10 // Вопросы атомной науки и техники (ВАНТ). Серия «Термоядерный синтез». 2012. № 4. С. 58–70.

5. **Дулов В. Г., Лукьянов Г. А.** Газодинамика процессов истечения. Новосибирск: Наука, 1984. 226 с.

6. **Изотов Б. А.** Расчет и построение профиля сопла Лаваля. Оренбург: Изд-во Государственного Оренбургского университета, 2009. 20 с.

7. **Кириллов А. В., Ротинян Е. М.** Механика жидкости и газа. Сопло Лаваля. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2017. 22 с.

8. **Пипко А. И., Плисковский В. Я., Пенчко Е. А.** Конструирование и расчет вакуумных систем. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Энергия, 1979. 504 с.

9. **Шишков А. А., Панин С. Д., Румянцев Б. В.** Рабочие процессы в ракетных двигателях твердого топлива: Справочник. М.: Машиностроение, 1988. 240 с.

10. **Shih T. H., Liou W. W., Shabbir A., Yang Z. Zhu J.** A new k-ε eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows // Computers & Fluids. 1995. Vol. 24. No. 3. Pp. 227–238.

11. **Волков К. Н., Емельянов В. Н., Зазимко В. А.** Турбулентные струи: статические модели и моделирование крупных вихрей. М.: Физматлит, 2014. 360 с.

12. **Шелухин Н. Н.** Исследование характеристик сверхзвуковой недорасширенной струи // Ученые записки ЦАГИ (Центральный аэрогидродинамический институт). 1995. Т. 26. № 1–2. С. 78–87.

REFERENCES

1. **Eidietis N. W.,** Prospects for disruption handling in a tokamak-based fusion reactor, Fusion Sci. Technol. 77 (7–8) (2021) 738–744.

2. **Landau L. D., Lifshitz E. M.,** Fluid mechanics (§ 97. Flow of gas through a nozzle), Second Ed. Vol. 6 of Course of Theoretical Physics. Pergamon Press, Oxford, New York, 1987.

3. **Hollmann E. M., Aleynikov P. B., Fülöp T., et al.,** Status of research toward the ITER disruption mitigation system, Phys. Plasmas. 22 (2) (2015) 021802.

4. **Dremin M. M., Kapralov V. G., Kislov A. Ya., et al.,** Effect of noble gas injection on discharge disruption in T-10 tokamak, Probl. At. Sci. Technol. Ser. “Thermonucl. Fusion” (4) (2012) 58–70 (in Russian).

5. **Dulov V. G., Lukyanov G. A.,** Gazodinamika protsessov istecheniya [Gas dynamics of outflow processes], Nauka, Novosibirsk,1984 (in Russian).

6. **Izotov B. A.,** Raschet i postroyeniye profilya sopla Lavalya [Calculation and profiling of De Laval nozzle], Orenburg State University Publishing, Orenburg, 2009 (in Russian).

7. **Kirillov A. B., Rotinyan E. M.,** Mekhanika zhidkosti i gaza. Soplo Lavalya [Fluid-flow mechanics. De Laval nozzle], Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg, 2017 (in Russian).

8. **Pipko A. I., Pliskovskii V. Ya., Penchko E. A.,** Konstruirovaniye i raschet vakuumnykh system [Design and calculation of vacuum systems], Energiya, Moscow, 1979 (in Russian).

9. **Shishkov A. A., Panin S. D., Rumyantsev B. V.,** Rabochiye protsessy v raketnykh dvigatelyakh tverdogo topliva: Spravochnik [Operation processes in solid rocket motors: Handbook], Mashinostroyeniye, Moscow, 1988 (in Russian).

10. **Shih T. H., Liou W. W., Shabbir A., et al.,** A new k-ε eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows, Comput. Fluids. 24 (3) (1995) 227–238.

11. **Volkov K. N., Emelyanov V. N., Zazimko V. A.,** Turbulentnyye strui: staticheskiye modeli i modelirovaniye krupnykh vikhrey [Turbulent jet flows: Statistical models and simulation of large vortices], Fizmatlit, Moscow, 2014. (in Russian).

12. **Shelukhin N. N.,** Issledovaniye kharakteristik sverkhzvukovoy nedorasshirennoy strui [Study of characteristics of a supersonic underexpanded jet flow], TsaGI Sci. J. 26 (1–2) (1995) 78–87 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТИМОХИН Владимир Михайлович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
v.timokhin@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4700-6122

КОРОБКО Дмитрий Дмитриевич – *студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
korobko.dd@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8559-3209

НУРТДИНОВА Линара Ильфатовна – *студентка Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nurtdinova.li@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1029-2049

КАПРАЛОВ Владимир Геннадиевич – *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
kapralov15@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1091-6405

СЕРГЕЕВ Владимир Юрьевич – *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
V.Sergeev@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4572-4120

THE AUTHORS

TIMOKHIN Vladimir M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
v.timokhin@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4700-6122

KOROBKO Dmitriy D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
korobko.dd@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8559-3209

NURTDINOVA Linara I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
nurtdinova.li@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1029-2049

KAPRALOV Vladimir G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kapralov15@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1091-6405

SERGEEV Vladimir Yu.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
V.Sergeev@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4572-4120

Статья поступила в редакцию 05.09.2023. Одобрена после рецензирования 04.10.2023. Принята 04.10.2023.
Received 05.09.2023. Approved after reviewing 04.10.2023. Accepted 04.10.2023.

Научная статья
УДК 539.21
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16407

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПАДЕНИЯ ИОНА ФУЛЛЕРЕНА НА ПОВЕРХНОСТЬ КРЕМНИЯ

К. П. Карасев [1, 2] ✉, Д. А. Стрижкин [1], П. А. Карасев [1], А. И. Титов [1]

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

[2] Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ kir.karasyov2017@yandex.ru

Аннотация. В работе выполнено моделирование взаимодействия ускоренных ионов фуллерена C_{60} с монокристаллом кремния. Исследовано влияние размеров модельного монокристалла на получаемые параметры кратера, образующегося в мишени при ударе, и распыление веществ мишени и фуллерена. Предлагаются причины возникновения вычислительных артефактов: это возврат энергии ударной волны через периодическую границу и не вполне корректное описание распределения принесенной энергии между атомами мишени. Установлено, что для получения достоверных (без размерных эффектов) результатов моделирования акта падения на монокристалл ионов C_{60}, обладающих энергиями 8 – 14 кэВ, необходимо использовать монокристаллы с размерами поверхности не менее 11 × 11 нм.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, ион фуллерена C_{60}, кремний, размерный эффект, кристалл, распыление

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Для цитирования: Карасев К. П., Стрижкин Д. А., Карасев П. А., Титов А. И. Размерные эффекты при молекулярно-динамическом моделировании падения иона фуллерена на поверхность кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 76–85. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16407

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16407

SIZE EFFECTS IN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF A FULLERENE ION IMPACT ON THE SILICON SURFACE

K. P. Karasev [1, 2] ✉, D. A. Strizhkin [1], P. A. Karaseov [1], A. I. Titov [1]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

[2] Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia

✉ kir.karasyov2017@yandex.ru

Abstract. In the paper, the interaction of an accelerated C_{60} fullerene ion with silicon monocrystal surface has been studied using molecular dynamics simulation. The dependence of a resulting crater size and sputtering yield on the initial size of the target was obtained. We proposed that computational artifacts revealed in simulations appeared due to two main reasons: shock waves raised by impinging the C_{60} ion, came back through the periodic boundary increasing the temperature around the impact point; dissipation of the energy, brought to the surface by the fullerene molecule, between small amount of atoms in the small cell might also affect the simulated results. It was established that 11 × 11 nm is the least size of lateral crystal dimensions required for the valid results of the simulation of the 8 – 14 keV C_{60} ion impact.

Keywords: molecular dynamics simulation, C_{60} fullerene ion, silicon, size effect, crystal, sputtering

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Karasev K. P., Strizhkin D. A., Karaseov P. A., Titov A. I., Size effects in molecular dynamics simulations of a fullerene ion impact on the silicon surface, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 76–85. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16407

Введение

Метод молекулярно-динамического (МД) моделирования широко используется в современной науке для изучения различных явлений на микроуровне. Он заключается в моделировании эволюции системы объектов (атомов) во времени, которая рассчитывается с помощью численного интегрирования уравнений движения. В приближении классической механики, движение ансамбля частиц может быть однозначно задано гамильтонианом, который определяется совокупностью обобщенных координат и импульсов. Этот гамильтониан характеризует полную энергию системы и полностью описывает ее динамическую природу. С помощью метода МД можно исследовать как простые кристаллические структуры, так и сложные биологические молекулы [1]. Метод МД также часто используют для исследования эффектов, возникающих при облучении различных мишеней ускоренными ионами. С помощью МД-моделирования были изучены механизмы формирования дефектов структуры [2] и рельефа поверхности мишени [3] при ионной бомбардировке. В частности, определены зависимости функции массопереноса и формы рельефа, получающегося на поверхности, от начального угла бомбардировки [3]. Кроме того, во многих работах изучали распыление ионов, падающих на поверхность: количество и состав вылетающих частиц, их угловое распределение по значениям начальной энергии бомбардирующих ионов [4].

Расчеты обычно направлены на определение сил, с которыми частицы взаимодействуют друг с другом, поскольку их значения нужны, чтобы затем рассчитывать координаты и импульсы атомов в последующие моменты времени. Результирующая сила обусловлена потенциалом взаимодействия и пространственной конфигурацией частиц и вычисляется для каждого момента времени.

Известно множество функций, разработанных для описания взаимодействия между частицами, например, парный потенциал Леннарда-Джонса [5], который позволяет вычислять силу взаимодействия двух атомов в зависимости от расстояния между ними. Его часто используют для моделирования двумерных структур, таких как графен или дихалькогениды переходных металлов. Однако парные потенциалы не учитывают зависимостей силы связи от направлений и положений соседних частиц в пространстве, что сужает сферу их применимости. Поэтому были разработаны многочастичные потенциалы, в частности, потенциал Терсоффа [6] и Стиллинджера – Вебера [7]. При определенных значениях параметров они хорошо описывают свойства монокристалла кремния, поэтому часто используются при вычислениях.

Важной особенностью, которую необходимо учитывать при проведении МД-симуляций, является ограниченность размеров рассматриваемой системы. Моделировать поведение макроскопических объектов с их помощью практически невозможно. Например, в экспериментах по бомбардировке поверхности ионами фуллерена [8] диаметр пучка может составлять от 0,1 до 5 мм, тогда как размеры облучаемых образцов – еще больше. Время облучения составляет от десятков секунд до нескольких часов. Однако моделирование движения такого количества атомов требует слишком большой вычислительной мощности, поэтому приходится использовать модели, включающие всего несколько десятков или сотен тысяч атомов. По сторонам мишени задаются периодические граничные условия, а для соответствия модели реальному образцу, на движение крайних слоев атомов кристалла дополнительно накладываются термостатирующие условия, позволяющие регулировать потоки тепла и тем самым дополнительно сокращать время расчета.

Из проведенных ранее исследований [9] известно, что в области вокруг точки падения кластерного иона появляется кратер, а по его краю формируется небольшое скопление атомов выше поверхности – бруствер. Кроме того, для ионов C_{60} установлено, что если их начальная энергия превышает 1 кэВ, то при падении на поверхность монокристалла кремния структура кластера полностью разрушается [10]. Атомы углерода проникают вглубь мишени и распределяются определенным образом, при этом часть частиц улетает с поверхности. Такие частицы называются распыленными и могут состоять как из одиночных атомов, так и из их конгломератов – кластеров.

При падении ускоренного иона на поверхность, его энергия передается атомам мишени, а часть ее (особенно при падении молекул или кластеров, состоящих их десятков и более атомов) может распространяться вглубь кристалла в виде ударной волны. Как уже отмечалось выше, размер применяемой при расчетах ячейки значительно влияет на вычислительные мощности и затрачиваемое расчетное время. С другой стороны, распространение ударной волны по модели кристалла малого размера и процесс диссипации энергии, принесенной ионом в этой модели, могут существенно отличаться от таковых в реальной мишени. Соответственно, моделирование будет давать некорректные величины получаемых в результате расчета эффектов, таких как распыление, образование кратера и т. п.

В настоящей работе проведено сравнение результатов моделирования одиночных случаев падения иона фуллерена C_{60} с энергиями 8 и 14 кэВ на поверхность монокристалла кремния, обладающего разными размерами, и проанализировано влияние этих размеров на получаемые результаты.

На основе полученных данных даются рекомендации по выбору оптимального размера расчетной ячейки для моделирования взаимодействия ускоренных молекул фуллерена с монокристаллом кремния.

Описание модели

Для проведения расчетов методом МД-моделирования использовался свободно распространяемый пакет Lammps [11]. Парное взаимодействие всех типов атомов описывалось с помощью потенциала Терсоффа [6]. Для описания взаимодействия частиц, обладающих высокой энергией, он был дополнен гладкосшитым потенциалом ZBL [12]. Исходная система состояла из кристалла кремния с открытой поверхностью (100), над которой на некоторой высоте была расположена молекула фуллерена C_{60}.

В латеральных направлениях применялись периодические граничные условия; три нижних слоя атомов были зафиксированы. По боковым и нижней сторонам кристалла применялся термостат Берендсена [13], состоящий из слоя атомов кремния толщиной в одну элементарную ячейку.

Температура мишени составляла примерно 0 K. Потери энергии быстрых частиц на взаимодействие с электронами мишени (электронные потери) учитывались как сила квазитрения, применяемая для частиц с энергией более 10 эВ. Рассматривалось несколько вариантов поперечных размеров мишени (в нм):

$$5{,}4 \times 5{,}4;\ 8{,}0 \times 8{,}0;\ 11{,}0 \times 11{,}0;\ 22 \times 22;\ 33 \times 33;\ 44 \times 44,$$

что соответствует значениям (в длинах элементарных ячеек)

$$10 \times 10,\ 15 \times 15,\ 20 \times 20,\ 40 \times 40,\ 60 \times 60 \text{ и } 80 \times 80.$$

Значения толщины мишени брались равными 11, 17 и 34 нм, т. е. в длинах ребра элементарной ячейки – 20, 31 и 63; длина ребра элементарной ячейки кремния равна 0,543 нм.

В начальный момент времени всем атомам молекулы C_{60} задавалась одинаковая скорость в нормальном направлении к поверхности мишени. Энергия падения фуллерена при этом принимала значения 8 и 14 кэВ, а исходная температура кристалла кремния равнялась 0 K. При расчетах использовался переменный временной шаг для увеличения точности вычислений на начальном этапе, а также для ускорения вычислений после того, как энергия частиц достаточно уменьшится.

Наибольшее значение временного шага составляло 1 фс. Выбор общего времени моделирования зависел от начальной энергии фуллерена, а именно – составлял 5 и 10 пс для значений 8 и 14 кэВ соответственно. После завершения моделирования проводился анализ структур, образованных на поверхности, и параметров распыленных частиц по методикам, описанным в работе [14]. Далее система приводилась в исходное состояние: молекулу фуллерена перемещали на малое случайное расстояние в латеральных направлениях (в пределах 2 × 2 элементарных ячейки) и начинался расчет новой траектории. Для каждой комбинации «размер кристалла – энергия иона C_{60}» рассчитывалось 50 независимых траекторий с целью уменьшить статистический разброс результатов.

Результаты и их обсуждение

Как было сказано во введении, при проведении МД-моделирования вычисления производятся для кристаллов с малыми размерами и периодическими граничными условиями. Добавление термостата вдоль граничных слоев обеспечивает диссипацию избытков энергии, принесенных в мишень ускоренным ионом. В то же время, при слишком малых размерах кристалла могут возникать различные вычислительные артефакты (т. е. результаты, не отображающие действительные процессы), поэтому необходимо по возможности избегать подобных явлений. Была проведена серия расчетов падений молекулы с энергиями 8 и 14 кэВ на кристаллы кремния различных размеров.

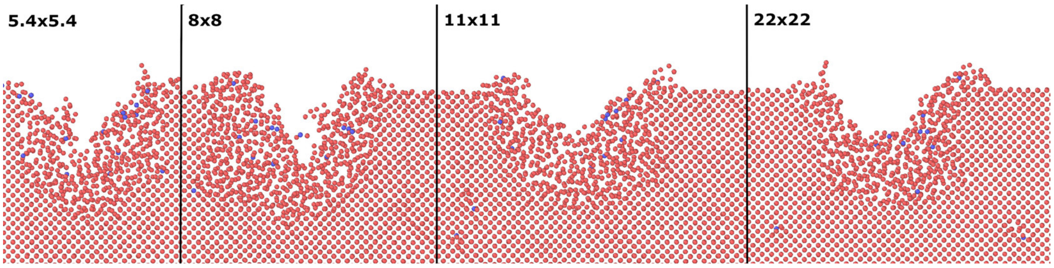


Рис. 1. Поперечные срезы области кремниевой мишени толщиной 10 Å
после падения иона фуллерена C_{60} с энергией 8 кэВ
(4 варианта поперечных размеров мишени (в нм))

На рис. 1 показано, как меняется вид поперечного среза толщиной 1 нм в области падения фуллерена с энергией 8 кэВ по мере увеличения поперечного размера мишени. Здесь глубина модельного кристалла во всех случаях равна 17 нм (31 длина элементарной ячейки кремния). Видно, что с увеличением размера в латеральных направлениях форма кратера изменяется: он становится шире и более сферическим. Кроме того, с высокой вероятностью несколько изменяется объем аморфизованной области мишени.

Рассмотрим изменение формы кратера более подробно, используя методики определения его объема, глубины и площади открытия, предложенные в работе [14]. На рис. 2,*a* показаны зависимости объема образующегося кратера от поперечных размеров модельного кристалла при постоянном значении толщины 17 нм. Нетрудно заметить, что при обоих значениях энергии объем кратера увеличился примерно в 2 раза с увеличением размера модели от 5,43 до 21,70 нм (от 10 до 40 элементарных ячеек) Этот эффект оказывается еще более выраженным, если увеличивать площадь открытия кратера, которую мы определяем на уровне первоначальной поверхности мишени [14]. В случае бомбардировки фуллереном с энергией 8 кэВ она изменяется от 3,0 до 5,5 нм^2, а с энергией 14 кэВ – от 3,5 до 8,0 нм^2. Увеличение же поперечных размеров модели до 20 × 20 нм и более практически не влияет на формирование кратера (см. рис. 2). Отметим (см. рис. 2,*c*), что максимальная глубина кратера практически не зависит от используемых поперечных размеров мишени.

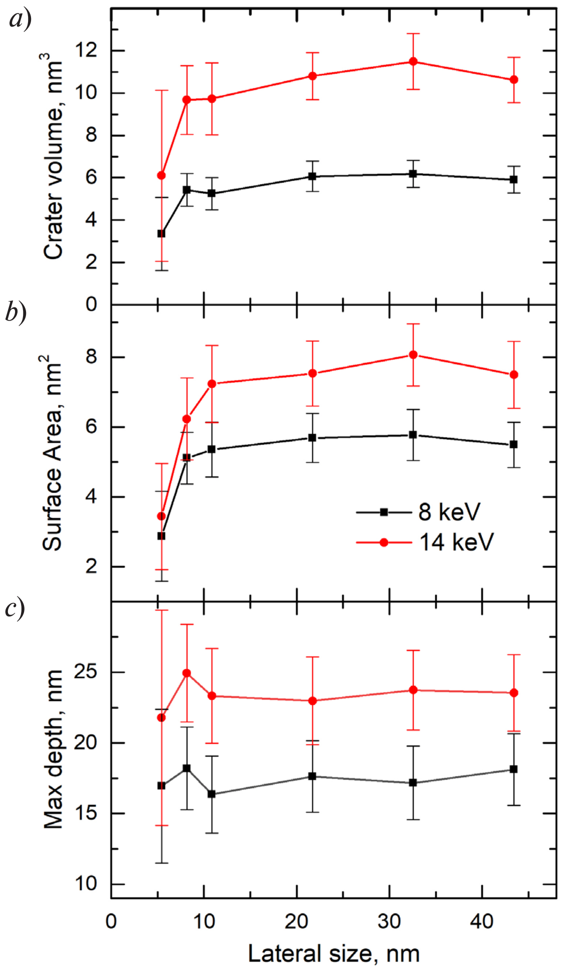


Рис. 2. Полученные зависимости объема (*a*), площади поверхности (*b*) и максимальной глубины (*c*) кратера, образующегося в кремниевой мишени глубиной 17 нм, от ее поперечных размеров.

Приведены результаты для значений энергии иона C_{60} 8 и 14 кэВ

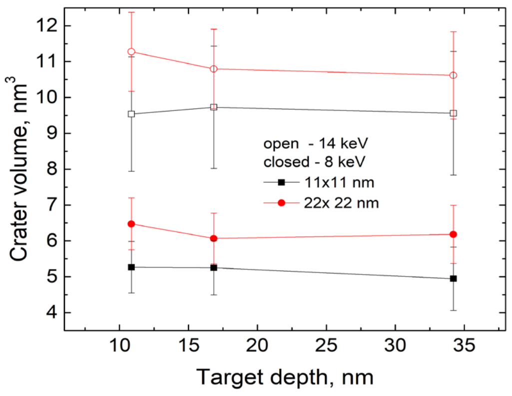


Рис. 3. Расчетные зависимости среднего объема кратера, образующегося при падении иона фуллерена с энергиями 8 и 14 кэВ, от глубины модельной мишени при поперечных размерах кристалла, равных 11 × 11 и 22 × 22 нм

Помимо поперечных размеров, существенную роль может играть и толщина рассматриваемого слоя мишени. Для выяснения этого вопроса была проведена серия расчетов с разными значениями глубины модели при поперечных размерах кристалла равных 11 × 11 и 22 × 22 нм. Полученные значения объема кратера показаны на рис. 3. Видно, что уменьшение глубины от 17 до 11 нм приводит к некоторым изменениям в значениях получаемых объемов, в то время как ее увеличение до 34 нм никак не сказывается на результатах. Площадь раскрытия кратера и его глубина также практически не зависят от толщины расчетной модели в рассмотренном диапазоне. Таким образом, при моделировании падения фуллеренов с энергиями 8 – 14 кэВ поперечные размеры модели играют более существенную роль в формировании возможных вычислительных артефактов, чем ее толщина, если последняя превышает 10 – 15 нм.

Как уже было упомянуто, при падении иона фуллерена часть атомов кремния получает кинетическую энергию, достаточную для преодоления сил межатомного притяжения, и вылетает с поверхности в виде распыленных частиц. Очевидно, что размеры расчетной модели могут сильно влиять на характеристики распыления, получаемого в результате моделируемого воздействия.

На рис. 4,*a* показаны полученные зависимости полного количества распыленных атомов и количества отраженных атомов углерода от поперечных размеров мишени. Видно, что при их увеличении в латеральных направлениях от 5 × 5 до 11 × 11 нм общее количество вылетающих частиц снижается приблизительно в 2 раза. Еще более заметно изменяется количество отраженных атомов углерода. Действительно, расчет с самой маленькой ячейкой дает 12 – 13 распыленных атомов углерода и зависит от энергии падающего фуллерена. При переходе к ячейке размером 11 × 11 нм оно уменьшается до 6 – 7. Дальнейшее увеличение поперечных размеров кристалла не влияет на получаемое распыление.

Сходная картина наблюдается и при анализе угловых распределений распыленных частиц (рис. 4,*b*). Видно, что для кристалла с малой площадью поверхности распределение имеет выраженный максимум в направлении 25° от нормали. С ростом размера распределение становится более симметричным, а максимум смещается к

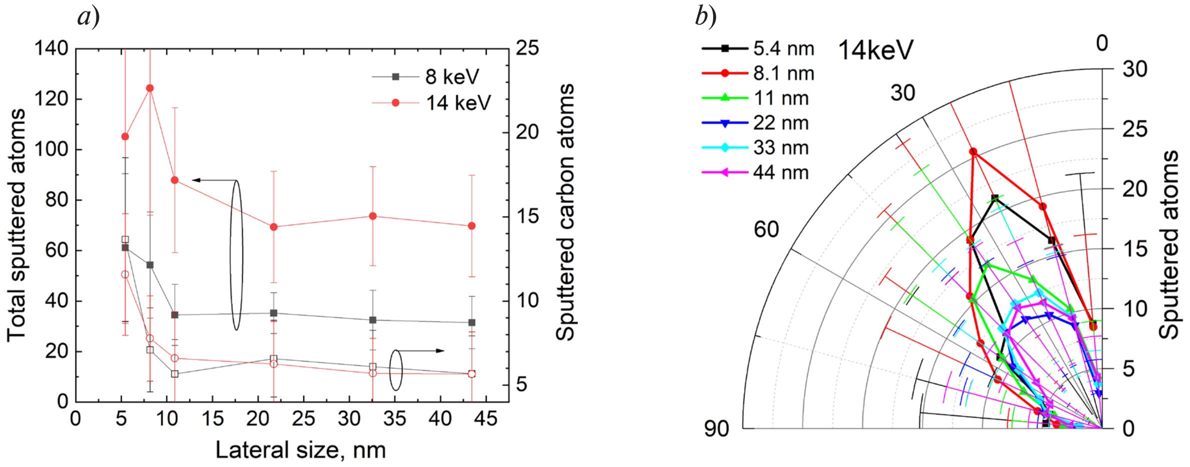


Рис. 4. Зависимости полного количества распыленных частиц и отраженных атомов углерода от поперечных размеров мишени (*a*), а также угловые распределения распыленных атомов для разных поперечных размеров кристалла глубиной 17 нм.

Показаны случаи падения иона фуллерена C_{60} с энергиями 8 и 14 кэВ (*a*), а также 14 кэВ (*b*)

направлению 35 – 40°. Дальнейшее увеличение ячейки в диапазоне 22 – 44 нм не приводит к изменению получаемого распределения.

Отметим, что величина статистического разброса получаемых значений как полного, так и дифференциального распыления, ощутимо снижается при использовании мишени размером 22 × 22 нм и больших. Варьирование глубины модельного кристалла практически не сказывается ни на абсолютном количестве распыленных частиц, ни на их распределениях.

Для того чтобы разобраться в причинах, приводящих к появлению обнаруженных вычислительных артефактов, было проанализировано распространение ударных волн, возникающих в мишени. На рис. 5 показаны характерные картины, полученные путем МД-моделирования, которые могут возникать в ходе взаимодействия в моделях глубиной 17 нм при разных поперечных размерах. Цвета атомов (мелкие кружки) отражают разные значения их кинетической энергии.

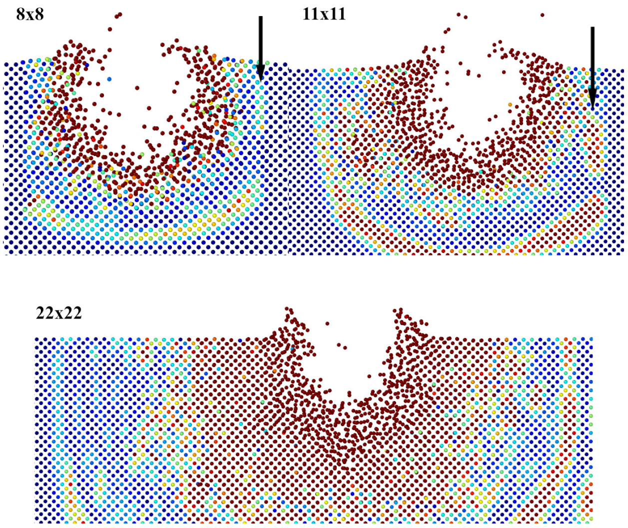


Рис. 5. Характерные виды поперечного среза (толщина 10 Å) модели глубиной 17 нм, возникающие в ходе взаимодействия иона фуллерена с мишенью при трех разных поперечных размерах мишени (в нм).

Цвета атомов (мелкие кружки) отражают разные значения их кинетической энергии (см. таблицу); стрелками указаны участки волн, прошедшие сквозь периодическую границу и распространяющиеся к области образования кратера

Таблица

Параметры отображения атомов мишени (см. рис. 5)

Поперечный размер мишени, нм	Кинетическая энергия атомов кремния, эВ	Промежуток времени, пс
8 × 8 × 17	0 – 0,20	0,4
11 × 11 × 17	0 – 0,05	0,5
22 × 22 × 17	0 – 0,01	1,1

Примечания. 1. Представлены промежутки времени между моментами касания поверхности ионом C_{60} и фиксациями паттернов, приведенных на рис. 5.
2. Ион C_{60} обладал энергией 8 кэВ.

На двух верхних паттернах (см. рис. 5, модели размером 8 × 8 и 11 × 11 нм) стрелками показаны участки волн, прошедшие сквозь периодическую границу и распространяющиеся в направлении не от области образования кратера, а к ней. В случае же моделирования на ячейке 22 × 22 нм подобного явления обнаружить не удалось: все видимые волны распространялись от точки падения и угасали в области термостата.

В таблице приведены моменты времени, в которые сделаны снимки, и диапазоны энергий, использованные для удобства отображения волновых процессов в разных случаях. Отметим, что значения энергии атомов кремния достигают 0,20 и 0,05 эВ в ячейках размерами 8 × 8 и 11 × 11 нм соответственно, т. е. рассчитываемые значения температуры вблизи кратера превышают 900 K. В ячейке размером 22 × 22 нм все атомы имеют энергию менее 0,01 эВ. Таким образом, энергия, принесенная ионом фуллерена, не успевает рассеяться в объем мишени при малых размерах ячейки и возвращается в область падения через периодические границы; это приводит к усиленной релаксации возникших дефектов и уменьшению размеров кратера за счет поддержания повышенной температуры в течение более длительного времени, чем в случае модельных кристаллов большего размера. С эффектом возвратной ударной волны может быть связано и усиление распыления, в том числе и в направлениях, расположенных ближе к нормали. В случае больших ячеек рассеяние и распределение принесенной энергии между атомами происходят более равномерно и лучше соответствуют картине, которая реализуется в экспериментальных условиях.

Заключение

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия иона фуллерена C_{60}, обладающего энергиями 8 и 14 кэВ, с поверхностью монокристалла кремния. В частности, исследовано влияние размеров этого монокристалла на получаемые результаты.

Обнаружено, что при энергии 8 кэВ и поперечных размерах менее 11 × 11 нм возникают различные вычислительные артефакты как в формировании кратера в мишени, так и в распылении частиц, вызванном ее бомбардировкой. Вариация глубины модельного кристалла в диапазоне от 11 до 33 нм практически не оказывала влияния на получаемые результаты. При энергии падающего иона фуллерена 14 кэВ, размеров ячейки 11 × 11 нм оказывалось недостаточно, поскольку при них были обнаружены несколько завышенные величины коэффициента распыления, хотя в формировании кратера артефактов не наблюдалось.

Как установлено, причинами возникновения артефактов являлись, во-первых, возврат энергии, принесенной фуллереном через периодические границы в область формирования кратера, и во-вторых, не совсем корректное расчетное распределение принесенной энергии между атомами мишени в случае малых моделей.

Анализ полученных результатов позволил сделать вывод, что моделирование взаимодействия с мишенью иона C_{60}, обладающего кинетической энергией менее 8 кэВ, целесообразно проводить на модели размерами 11 × 11 нм, а для случая энергии 14 кэВ рекомендуется использовать ячейки больших размеров в латеральных направлениях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Arnittali M., Rissanou A. N., Amprazi M., Kokkinidis M., Harmandaris V.** Structure and thermal stability of wtRop and RM6 proteins through all-atom molecular dynamics simulations and experiments // International Journal of Molecular Sciences. 2021. Vol. 22. No. 11. P. 5931.

2. **Ullah M. W., Kuronen A., Nordlund K., Djurabekova F., Karaseov P. A., Titov A. I.** Atomistic simulation of damage production by atomic and molecular ion irradiation in GaN // Journal of Applied Physics. 2012. Vol. 112. No. 4. P. 043517.

3. **Maciążek D., Kański M., Postawa Z.** Intuitive model of surface modification induced by cluster ion beams // Analytical Chemistry. 2020. Vol. 92. No. 10. Pp. 7349–7353.

4. **Aoki T., Matsuo J.** Molecular dynamics study of surface modification with a glancing angle gas cluster ion beam // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. 2007. Vol. 255. No. 1. Pp. 265–268.

5. **Lennard-Jones J. E.** On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas // Proceedings of the Royal Society A, London. 1924. Vol. 106. No. 738. Pp. 463–477.

6. **Tersoff J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Physical Review B. 1988. Vol. 37. No. 12. Pp. 6991–7000.

7. **Stillinger F. H., Weber T. A.** Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // Physical Review B. 1985. Vol. 31. No. 8. Pp. 5262–5271.

8. **Khadem M., Pukha V., Penkov O., Khodos I., Belmesov A., Nechaev G., Kabachkov E., Karaseov P., Kim D.-E.** Formation of wear-resistant graphite/diamond-like carbon nanocomposite coatings on Ti using accelerated C_{60}-ions // Surface and Coatings Technology. 2021. Vol. 424. 25 October. P. 127670.

9. **Aoki T., Seki T., Matsuo J.** Molecular dynamics simulations for gas cluster ion beam processes // Vacuum. 2010. Vol. 84. No. 8. Pp. 994–998.

10. **Скрипов И. Н., Карасев К. П., Стрижкин Д. А., Карасев П. А.** Исследование поверхностных явлений при падении ускоренного иона C_{60} на монокристалл кремния // Неделя науки ИЭиТ (Институт электроники и телекоммуникаций). Материалы Всероссийской конференции. СПб., СПбПУ. 15–19 ноября 2021. С. 55–57.

11. **Thompson A. P., Aktulga H. M., Berger R., et al.** LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Computer Physics Communications. 2022. Vol. 271. February. P. 108171.

12. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.** The stopping and range of ions in matter (Book series: Stopping and range of ions in matter. Vol. 1). New York: Pergamon, 1985. 321 p.

13. **Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., van Gunsteren W. F., DiNola A., Haak J. R.** Molecular dynamics with coupling to an external bath // The Journal of Chemical Physics. 1984. Vol. 81. No. 8. Pp. 3684–3690.

14. **Karasev K., Strizhkin D., Karaseov P.** The way to analyze MD simulation results of cluster ion bombardment // IEEE Xplore Proceedings of the 2023 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech-2023). St. Petersburg, SPbPU, October 19–20, 2023. Pp. 282–284.

REFERENCES

1. **Arnittali M., Rissanou A. N., Amprazi M., et al.,** Structure and thermal stability of wtRop and RM6 proteins through all-atom molecular dynamics simulations and experiments, Int. J. Mol. Sci. 22 (11) (2021) 5931.

2. **Ullah M. W., Kuronen A., Nordlund K., et al.,** Atomistic simulation of damage production by atomic and molecular ion irradiation in GaN, J. Appl. Phys. 112 (4) (2012) 043517.

3. **Maciążek D., Kański M., Postawa Z.,** Intuitive model of surface modification induced by cluster ion beams, Anal. Chem. 92 (10) (2020) 7349–7353.

4. **Aoki T., Matsuo J.,** Molecular dynamics study of surface modification with a glancing angle gas cluster ion beam, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 255 (1) (2007) 265–268.

5. **Lennard-Jones J. E.,** On the determination of molecular fields. – II. From the equation of state of a gas, Proc. R. Soc. Lond. 106 (738) (1924) 463–477.

6. **Tersoff J.,** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, Phys. Rev. B. 37 (12) (1988) 6991–7000.

7. **Stillinger F. H., Weber T. A.,** Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, Phys. Rev. B. 31 (8) (1985) 5262–5271.

8. **Khadem M., Pukha V., Penkov O., et al.,** Formation of wear-resistant graphite/diamond-like carbon nanocomposite coatings on Ti using accelerated C_{60}-ions, Surf. Coat. Technol. 424 (25 Oct) (2021) 127670.

9. **Aoki T., Seki T., Matsuo J.,** Molecular dynamics simulations for gas cluster ion beam processes, Vacuum. 84 (8) (2010) 994–998.

10. **Skripov I. N., Karasev K. P., Strizhkin D. A., Karasev P. A.,** Issledovaniye poverkhnostnykh yavleniy pri padenii uskorennogo iona C_{60} na monokristall kremniya [Study of surface phenomena in the impact of an accelerated C_{60} ion on a Si monocrystal], In book of abstracts: Proceedings of All-Russian Conference “Scientific week at Institute of Electronics and Telecommunications of St. Petersburg Polytechnical University”, Nov. 15–19 2021, SPb. (2021) 55–57 (in Russian).

11. **Thompson A. P., Aktulga H. M., Berger R., et al.,** LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, Comp. Phys. Commun. 271 (Febr) (2022) 108171.

12. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.,** The stopping and range of ions in matter (Book series: Stopping and range of ions in matter. Vol. 1), Pergamon, New York, 1985.

13. **Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., van Gunsteren W. F., et al.,** Molecular dynamics with coupling to an external bath, J. Chem. Phys. 81 (8) (1984) 3684–3690.

14. **Karasev K., Strizhkin D., Karaseov P.,** The way to analyze MD simulation results of cluster ion bombardment, IEEE Xplore Proc. 2023 Int. Conf. Electric. Eng. Photon. (EExPolytech-2023), Oct. 19–20 2023, St. Petersburg, SPbPU, (2023) 282–284.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАРАСЕВ Кирилл Платонович – *инженер-исследователь Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, студент Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kir.karasyov2017@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-0969-0162

СТРИЖКИН Денис Александрович – *лаборант-исследователь Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
strdenis02@gmail.com
ORCID: 0009-0003-1062-8360

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

ТИТОВ Андрей Иванович – *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
andrei.titov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

THE AUTHORS

KARASEV Kirill P.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Alferov University of RAS
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kir.karasyov2017@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-0969-0162

STRIZHKIN Denis A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
strdenis02@gmail.com
ORCID: 0009-0003-1062-8360

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

TITOV Andrei I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
andrei.titov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

Статья поступила в редакцию 01.12.2023. Одобрена после рецензирования 04.12.2023. Принята 04.12.2023.

Received 01.12.2023. Approved after reviewing 04.12.2023. Accepted 04.12.2023.

Математическая физика

Научная статья
УДК 532.5: 532.591: 532.592.2
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16408

ФУРЬЕ-АНАЛИЗ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

В. Г. Гневышев [1], **Т. В. Белоненко** [2] ✉

[1] Институт океанологии им. П. П. Ширшова, РАН, Москва, Россия;

[2] Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

✉ btvlisab@yandex.ru

Аннотация. В работе обсуждаются определение и основные свойства преобразования Фурье. На конкретных примерах показано, что с его помощью, а также через использование его свойств можно найти интегральные решения модельного неоднородного уравнения, нестационарной задачи Коши на неоднородном сдвиговом потоке и краевой задачи о трансформации внутренних волн в окрестности фокуса в неоднородной среде. Построенные интегралы Фурье опровергают широко распространенное утверждение, что Фурье-анализ непригоден для исследования неоднородных сред.

Ключевые слова: Фурье-анализ, преобразование Лапласа, задача Коши, волны, неоднородная среда

Финансирование. Исследование выполнено в рамках государственного задания Института океанологии РАН № FMWE-2021-0003 и при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 22-27-00004.

Для цитирования: Гневышев В. Г., Белоненко Т. В. Фурье-анализ в неоднородных средах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 86—100. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16408

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16408

THE FOURIER ANALYSIS IN INHOMOGENEOUS MEDIA

V. G. Gnevyshev [1], **T. V. Belonenko** [2] ✉

[1] Shirshov Institute of Oceanology, RAS, Moscow, Russia;

[2] St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

✉ btvlisab@yandex.ru

Abstract. In the paper, the definition and basic properties of the Fourier transform (FT) are discussed. It has been shown with specific examples that integral solutions of the model inhomogeneous equation, the nonstationary Cauchy problem on an inhomogeneous shear flow, and the boundary value problem on the transformation of internal waves in the vicinity of the focus in the inhomogeneous medium can be found by FT and using its properties. The constructed Fourier integrals refuted the widely held claim that the Fourier analysis is unusable for the study of inhomogeneous media.

Keywords: Fourier analysis, Laplace transform, Cauchy problem, waves, inhomogeneous medium

Funding: The reported study was carried out within the framework of the of the State Assignment No. FMWE-2021-0003 of Shirshov Institute of Oceanology, RAS, and was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-27-00004).

For citation: Gnevyshev V. G., Belonenko T. V., The Fourier analysis in inhomogeneous media, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 86–100. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16408

Введение

Метод Фурье-преобразования дифференциального уравнения считается хотя и не единственным, но одним из наиболее эффективных методов решения краевых задач, когда в многомерной задаче происходит разделение переменных. Однако широко распространена ошибочная точка зрения о неприменимости Фурье-анализа для неоднородных сред. Например, в монографии Дж. Уизема [1, С. 365] говорится следующее (перевод с английского оригинала):

> «Для неоднородной среды, или для нелинейных задач, где преобразование Фурье неприменимо...».

Аналогичное утверждение находим в книге Дж. Лайтхилла [2, С. 425] (тоже перевод):

> «...необходимость использования разложения Фурье ограничивает нас *однородными* [курсив автора книги], системами, обычно описываемыми уравнениями с *постоянными* коэффициентами, так что каждая Фурье-компонента (синусоидальная волна постоянной амплитуды) по отдельности может быть решением уравнений движения».

Авторы этих и многих других монографий (см., например, работы [3, 4]) полагают, что использовать Фурье-анализ можно только в тех случаях, когда коэффициенты дифференциального уравнения постоянны и, наоборот, его нельзя применять, если эти коэффициенты не постоянны.

В данной работе мы доказываем, что Фурье-анализ можно применять в задачах, содержащих дифференциальные уравнения с переменными коэффициентами. Более того, задача может быть двумерной и при этом с неразделяемыми переменными, однако Фурье-анализ все равно применим.

Таким образом, цель данной работы – расширить границы области применимости Фурье-анализа, распространив его подходы на задачи в неоднородных средах.

Определение и основные свойства преобразования Фурье

Преобразование Фурье определяется следующим образом.

Прямое:

$$\varphi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-ikx)\,\Phi(x)\,dx; \tag{1}$$

обратное:

$$\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(+ikx)\,\varphi(k)\,dk. \tag{2}$$

Свойства преобразования Фурье можно найти, например, в монографии [1]. Они выводятся дифференцированием по параметру или путем интегрирования по частям (см, например, работу [5]). При этом считается, что функция $\Phi(x)$ убывает на бесконечности быстрее любой степени $|x|^{-1}$. Перечислим кратко те свойства преобразования, которые нам понадобятся в дальнейшем.

Фурье-образ производной функции. Выведем это свойство путем интегрирования по частям формулы прямого преобразования Фурье (1):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-ikx)\frac{\partial\Phi}{\partial x}dx=\frac{ik}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-ikx)\,\Phi(x)\,dx=ik\varphi(k). \tag{3}$$

Отметим, что этот же результат можно получить путем дифференцирования по x как по параметру с помощью формулы (2) обратного преобразования Фурье:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-ikx\right)\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}dx=\frac{\left(ik\right)^2}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-ikx\right)\Phi\left(x\right)dx=-k^2\varphi\left(k\right). \tag{4}$$

Для краткости данное свойство преобразования Фурье можно записать следующим образом:

$$\Phi\to\varphi,\quad \Phi_x\to ik\varphi,\quad \Phi_{xx}\to -k^2\varphi. \tag{5}$$

Свойства (5) часто используются в задачах с постоянными коэффициентами для однородных сред.

Фурье-образ функции с линейным множителем. Для представления данного свойства сначала проинтегрируем по частям преобразование (2):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(+ikx\right)\frac{\partial\varphi}{\partial k}dk=\left(-ix\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(+ikx\right)\varphi\left(k\right)dk=\left(-ix\right)\Phi\left(x\right). \tag{6}$$

Идентичное выражение можно получить дифференцированием по параметру k соотношения (1). Умножим обе части выражения (6) на мнимую единицу и запишем его в следующем виде:

$$x\Phi\to i\varphi_k. \tag{7}$$

Фурье-образ второй производной с линейным множителем. Покажем это свойство, интегрируя по частям и дважды дифференцируя по параметру соотношение (2); тогда получаем следующую формулу:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(+ikx\right)\frac{\partial\left(k^2\varphi\right)}{\partial k}dk=\left(-ix\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(+ikx\right)k^2\varphi\left(k\right)dk=\left(ix\right)\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}, \tag{8}$$

которую перепишем в виде

$$x\Phi_{xx}\to -i\left(k^2\varphi\right)_k. \tag{9}$$

Одномерные эталонные уравнения

Нахождение решения с помощью преобразования Фурье разбиваем на два этапа. На первом строим формальное решение дифференциального уравнения в Фурье-пространстве с помощью операторного анализа (см. предыдущий раздел). На втором этапе решаем вопрос об условиях, при которых сходится это формально построенное решение. Определяем контур интегрирования в комплексном пространстве и находим асимптотические выражения в каждом секторе [6, 7].

Пример 1. Рассмотрим неоднородное дифференциальное уравнение, возникающее при анализе волновых процессов в неоднородной плазме, а также при изучении неустойчивости в задаче Орра – Зоммерфельда [6], [8, уравнение (1.28), см. «Список литературы» на русском языке]:

$$\Phi_{yyyy}+\lambda^2\left(y\Phi_{yy}+\gamma\Phi\right)=0. \tag{10}$$

Построим формальное решение для этого примера. В Фурье-пространстве (будем обозначать Фурье-пространство как l) образ уравнения (10) имеет вид

$$l^4\varphi+\lambda^2\left[-i\left(l^2\varphi\right)_l+\gamma\varphi\right]=0. \tag{11}$$

Перепишем уравнение (11) в следующем виде:

$$\frac{1}{\lambda^2}l^2P-iP_l+\frac{\gamma}{l^2}P=0,\quad P=l^2\varphi. \tag{12}$$

Оно представляет собой однородное дифференциальное уравнение первого порядка (в математической литературе такие уравнения называют квадратурой (см., например, работу [9]).

Интегрируя уравнение (11), получаем следующее выражение:

$$\varphi = \frac{1}{l^2}\exp\left(-i\frac{1}{3\lambda^2}l^3 + i\frac{\gamma}{l}\right). \tag{13}$$

Обратное преобразование Фурье дает такое решение:

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{l^2}\exp\left(-i\frac{1}{3\lambda^2}l^3 + i\frac{\gamma}{l} + ily\right)dl. \tag{14}$$

Далее следует сделать замену переменой $t = il$, которая преобразует интеграл Фурье в интеграл Лапласа. Здесь важно отметить, что многие рассматривают преобразование Лапласа как частный случай преобразования Фурье (см., например, книгу [5, ф-лы (1.4.1), (1.4.2), «Список литературы» на русском языке]).

Для сходимости интегралов воспользуемся теоремой Коши об аналитической функции и заменим пределы интегрирования на некие контуры в комплексной плоскости. Возникающую при этом специфику обхождения полюса и выбор секторов, в которых проходит контур интегрирования, мы не рассматриваем в данной работе, так как эти вопросы подробно обсуждаются во многих монографиях, в частности в книге [12], где автор строит изложение, исходя из преобразования Лапласа, в отличие от соответствующего обсуждения в монографии [5].

Таким образом, мы получаем следующий интеграл, который в литературе принято называть интегралом Лапласа:

$$\varphi = \frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{1}{t^2}\exp\left(\frac{1}{3\lambda^2}t^3 - \frac{\gamma}{t} + ty\right)dt. \tag{15}$$

В книге [6] этот интеграл приводится без выкладок. В нашей работе мы показываем, как самостоятельно вывести это формальное решение, причем с помощью преобразования Фурье, а не Лапласа.

Пример 2. Рассмотрим уравнение, описывающее топографические волны на неоднородном континентальном шельфе на f-плоскости. В монографии [19] говорится, что решение данного неоднородного уравнения можно построить с помощью преобразования Лапласа, и предлагается читателю сделать это самостоятельно.

Мы же построим формальное решение при помощи преобразования Фурье и покажем тождественность подходов к преобразованиям и Фурье, и Лапласа. Рассмотрим уравнение

$$xF_{xx} + F_x + \left(\mu k - k^2 x\right)F = 0. \tag{16}$$

Введем безразмерную переменную $\chi = kx > 0$. Тогда уравнение (16) примет вид

$$\chi F_{\chi\chi} + F_\chi + \left(\mu k - \chi\right)F = 0. \tag{17}$$

В Фурье-пространстве по переменной χ (будем обозначать его как l) образ уравнения (17) имеет вид

$$-i\left(l^2\Phi\right)_l + il\Phi + \mu\Phi - i\Phi_l = 0. \tag{18}$$

Введем новую переменную $s = il$. Тогда уравнение (18) примет вид

$$\frac{\Phi_s}{\Phi} = \frac{\mu - s}{s^2 - 1} = \frac{\mu - 1}{2(s-1)} - \frac{\mu + 1}{2(s+1)}. \tag{19}$$

Интегрируя уравнение (19) и выполняя обратное преобразование Фурье, получаем следующий формальный интеграл:

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i}}\int_C \frac{(s-1)^{(\mu-1)/2}}{(s+1)^{(\mu+1)/2}}\exp(skx)\,ds. \tag{20}$$

Построенный здесь интеграл с точностью до множителя совпадает с формулой (25.20) в монографии [19], где также можно найти анализ интеграла (20) с выбором контуров интегрирования.

Итоги раздела «Одномерные эталонные уравнения». Следуя подходу, изложенному в монографии [5], можно сделать замену переменной, и тогда свойства преобразования Фурье перейдут в свойства преобразования Лапласа. Таким образом, согласно утверждению, сделанному в работе [5], преобразование Фурье – это некое базовое преобразование, из которого следуют остальные преобразования, например типа Лапласа и Меллина. Аналогичного подхода придерживаются авторы монографии [9], которые построили фундаментальные решения оператора теплопроводности, операторов Лапласа и Гельмгольца, а также волнового оператора через преобразование Фурье.

Таким образом, в одномерных неоднородных средах не существует принципиальной разницы между Фурье-анализом и преобразованием Лапласа. Можно считать, что решение построено через преобразование Лапласа, но можно также и утверждать, что решение выводится через преобразование Фурье и теорему Коши. Следуя в дальнейшем работе [5], мы будем придерживаться второго подхода.

Нестационарная задача Коши для волн Россби на зональном течении

В качестве первого примера двумерного преобразования Фурье в неоднородных средах рассмотрим нестационарную задачу Коши для волн Россби. Эту задачу решил Т. Ямагата в 1976 году с применением конвективных координат [20]. Конвективные координаты являются распространенным способом для оператора типа $\partial t + U(y)\,\partial x$; для случая линейного профиля скорости $U(y) = U_y y$ конвективные координаты переводят неоднородное дифференциальное уравнение в однородное, а затем применяется преобразование Фурье по пространственным конвективным координатам (двумерное преобразование). Далее получается нестационарное дифференциальное уравнение по t.

Принципиально важно, что нет смысла делать и преобразование Лапласа по переменной t, как это принято в некоторых математических школах (см., например, работу [15]). Проще решить дифференциальное уравнение по t в явной форме, чем делать дополнительное преобразование. Решив дифференциальное уравнение по t и взяв обратное преобразование Фурье по конвективным координатам, можно совершить переход от конвективных переменных к обычным и получить решение в виде двумерного преобразования Фурье.

Далее мы можем найти решение неоднородного дифференциального уравнения и, повторив выкладки, получить решение Ямагаты, однако у нас другая идея. Мы не будем переходить к конвективным координатам с целью избавиться от неоднородности дифференциального уравнения, чтобы затем выполнить преобразование Фурье. Мы сразу применим преобразование Фурье для неоднородного дифференциального уравнения, используя его свойства. Таким образом, с одной стороны, мы значительно сократим количество операций, а с другой – мы придем к известному результату и подтвердим правильность математических выкладок. Продемонстрируем этот подход на решенной выше задаче, однако решим ее новым, более коротким способом, который позволяет сразу найти Фурье-образ неоднородного дифференциального уравнения.

Пример 3. Линейная задача Коши для баротропных бездивергентных волн Россби на зональном сдвиговом потоке рассмотрена в работе [20], а ее обобщение на случай дивергентных волн – в работе [18]:

$$\left(\partial_t + U_y\, y\,\partial_x\right)\left(\Psi_{xx} + \Psi_{yy}\right) + \beta\,\Psi_x = 0, \tag{21}$$

где Ψ – функция тока; β – классический параметр, $\beta = \dfrac{df}{dy}$ ($f = 2\Omega\sin\varphi$, Ω – угловая скорость вращения Земли, φ – широта); ось x направлена на восток, ось y – на север.

Пусть имеется неоднородное сдвиговое зональное течение $U(y) = U_y y$, где $U_y = \text{const}$. Выполним двумерное преобразование Фурье для неоднородного дифференциального уравнения (22) по двум пространственным переменным x и y (не переходя к конвективным переменным):

$$\Psi\left(x, y, t\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \varphi\left(k, l, t\right)\exp\left[+i\left(kx + ly\right)\right]dk\,dl. \tag{22}$$

Тогда уравнение (21) в Фурье-пространстве принимает вид

$$\left[\left(-k^2-l^2\right)\varphi\right]_t - U_y k\left[\left(-k^2-l^2\right)\varphi\right]_l + i\beta k\,\varphi = 0, \tag{23}$$

где нижние индексы обозначают частные производные.

Данное уравнение однородно, содержит только первые частные производные и легко решается.

Перепишем уравнение (23) в следующем виде:

$$P_t - U_y k\, P_l - \frac{i\beta k}{k^2+l^2}P = 0, \quad P \equiv \left(k^2+l^2\right)\varphi. \tag{24}$$

Сделав замену переменных ($\tau = t$, $l' = l + kU_y t$), получаем следующее уравнение:

$$P_\tau - \frac{i\beta kP}{k^2+\left(l'-kU_y\,\tau\right)^2} = 0. \tag{25}$$

Уравнение (25) можно проинтегрировать явно (экспонента от арктангенса), и тогда окончательное решение имеет вид двойного интеграла Фурье:

$$\begin{gathered}\Psi\left(x,y,t\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} g_1\left(k,l\right)\frac{k^2+l^2}{k^2-\left(l-kU_y\,t\right)^2}\times \\ \times\exp\left\{i\frac{\beta}{kU_y}\left[\arctan\left(\frac{l}{k}\right)-\arctan\left(\frac{l}{k}-U_y t\right)\right]\right\}\times \\ \times\exp\left\{+i\left[kx+\left(l-kU_y t\right)y\right]\right\}dk\,dl,\end{gathered} \tag{26}$$

где решение нормировано на начальное условие

$$g_1\left(k,l\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi\left(x,y,t=0\right)\cdot\exp\left[-i\left(kx+ly\right)\right]dx\,dy. \tag{27}$$

Анализ двойного интеграла Фурье методом стационарной фазы и построение траекторий волновых пакетов можно найти в работе [20]. Важно отметить, что эти работы свободны от предположения, что переменная времени должна быть большой.

Нестационарная задача Коши для волн Россби на меридиональном течении

В качестве четвертого примера рассмотрим нестационарную задачу Коши для волн Россби на меридиональном течении. Решение этой задачи с применением конвективных координат можно найти в работе [20].

Пример 4. Он относится к случаю линейного профиля скорости меридионального течения. Линейная задача Коши для баротропных бездивергентных волн Россби имеет следующий вид [20]:

$$\left(\partial_t + V_x x\,\partial_y\right)\left(\Psi_{xx}+\Psi_{yy}\right)+\beta\Psi_x = 0, \tag{28}$$

где β – классический параметр; ось x направлена на восток, ось y – на север.

Имеется неоднородное меридиональное сдвиговое течение $V(x) = V_x x$, где $V_x = \text{const}$. Как и ранее (см. Пример 3), выполним двумерное преобразование Фурье для неоднородного дифференциального уравнения (28) по двум пространственным переменным x и y. Тогда уравнение (28) в Фурье-пространстве принимает вид

$$\left[\left(-k^2-l^2\right)\varphi\right]_t - U_x l\left[\left(-k^2-l^2\right)\varphi\right]_k + i\beta k\,\varphi = 0. \tag{29}$$

Это уравнение однородно, содержит только первые частные производные и легко решается. Перепишем его в следующем виде:

$$P_t - U_x l P_k - \frac{i\beta k}{k^2+l^2} P = 0, \quad P \equiv \left(k^2+l^2\right)\varphi. \tag{30}$$

Сделав замену переменных ($\tau = t$, $k' = k + lU_x t$), получаем следующее уравнение:

$$P_\tau - \frac{i\beta\left(k' - lU_x\tau\right)P}{\left(k' - lU_x\tau\right)^2 + l^2} = 0. \tag{31}$$

Уравнение (31) можно проинтегрировать явно (экспонента от логарифма), и тогда окончательное решение имеет вид двойного интеграла Фурье:

$$\Psi(x,y,t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} g_2(k,l)\frac{k^2+l^2}{\left(k-lU_x t\right)^2+l^2}\exp\left\{i\frac{\beta}{2lU_x}\ln\left[\frac{\left(k-lU_x t\right)^2+l^2}{k^2+l^2}\right]\right\}\times$$
$$\times\exp\left\{+i\left[\left(k-lU_x t\right)x+ly\right]\right\}dk\,dl, \tag{32}$$

где решение нормировано на начальное условие

$$g_2(k,l) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,y,t=0)\exp\left[-i(kx+ly)\right]dx\,dy. \tag{33}$$

Анализ двойного интеграла Фурье методом стационарной фазы и построение траекторий волновых пакетов можно найти в работе [20].

Рассмотренные примеры являются простыми в том смысле, что полученные двойные интегралы уже известны. Новизна нашего решения состоит в том, что решение формально построено прямым Фурье-преобразованием неоднородного дифференциального уравнения без привлечения конвективных координат.

Перейдем теперь к более сложной задаче, где решение в виде интеграла Фурье краевой задачи ранее не было известно, но оно рассматривалось в терминах специальных функций от комплексных переменных. Сама процедура построения некой комплексной переменной для специальной гипергеометрической функции и интегрирование по некой окружности в комплексном пространстве подсказывает, что должен быть способ получить данное решение через прямое преобразование Фурье исходного неоднородного дифференциального уравнения с неразделяемыми переменными.

Эталонное уравнение для двухмерной неоднородной среды. Аномальная фокусировка внутренних волн

В рассмотренных выше примерах решение искалось в виде двумерного интеграла Фурье, при этом неоднородность внешнего поля (поле скорости фонового течения, или топография), носили одномерный характер.

Теперь рассмотрим более сложный пример задачи с двумерной неоднородностью внешнего поля.

Пример 5. В теории аномальной фокусировки внутренних волн в двумерно-неоднородной жидкости эталонное уравнение эллиптико-гиперболического типа для вертикального смещения в окрестности фокуса имеет следующий вид [13, уравнение (2.5)]:

$$\Psi_{zz} + \left(\frac{y}{L_y} + \frac{z^2}{L_z^2}\right)\Psi_{yy} + \frac{2}{L_y}\Psi_y = 0, \tag{34}$$

где Ψ – функция тока; (x, y, z) – прямоугольная система координат; L_y, L_z – величины длины неоднородностей по осям y и z.

Будем искать решения, локализованные в малой окрестности некоторого уровня по вертикальной координате и экспоненциально затухающие вне этого уровня; здесь для случая внутренних волн введены следующие обозначения [13]:

$$\frac{1}{L_y} = 2\nabla_y \ln\Omega, \quad \frac{1}{L_z^2} = \frac{\nabla_z^2\Omega}{\Omega} - \frac{\nabla_z^2 N}{N}, \tag{35}$$

где $\Omega = \omega - kU$ (ω – частота, k – зональное волновое число, U (z, y) – неоднородное горизонтальное фоновое течение со сдвигом); $N^2(z) = -g\dfrac{d}{dz}\ln\rho_0(z)$ ($\rho_0(z)$ – плотность).

Значение всех производных берется в фокусной точке. Поскольку уравнение (34) инвариантно относительно масштабного преобразования $z = az'$, $y = a^2y'$, вводится некая автомодельная переменная. Решение строится как суммирование всех частных решений по гипергеометрическим функциям от комплексного аргумента. При этом сама процедура построения этой комплексной переменной не совсем понятна. Не совсем также понятно, что это за функции, которые рассматривают авторы работы [13], откуда эти функции появляются, какова их физическая природа и что означают первичное и вторичное квантование при построении асимптотик решения. Отметим при этом, что асимптотики двумерной функции строятся одномерными только на оси волновода.

Для того чтобы, с одной стороны, осмыслить эти решения в специальных функциях от комплексных аргументов, а с другой представить данные классы решений с помощью классического преобразования Фурье и его свойств (представлены выше), мы самостоятельно построим решение в интегральной форме, найдем его двумерные асимптотики и покажем, что означают первичные и вторичные квантования в терминах классической задачи Штурма – Лиувилля. Для этого можно взять за основу известные интегральные представления гипергеометрической функции, и тогда идея нахождения решения станет более прозрачной. В некотором смысле мы идем от интегрального представления, но поиск решения лучше изложить в обратном направлении.

Решение уравнения (34) ищем в виде интеграла Фурье. Сначала ограничимся верхней половиной интеграла:

$$\Psi\left(k, y, z, \omega\right) = \int\limits_0^\infty G\left(k, l, z, \omega\right)\exp\left(ily\right)dl. \qquad (36)$$

На самом деле возникает резонный вопрос, брать ли весь интеграл или только верхнюю (или нижнюю) его часть. Обсуждение этой проблемы мы дадим далее, в заключительной части работы.

Используем снова свойства преобразования Фурье:

$$\Psi \to G, \quad \Psi_y \to i\,l\,G, \quad \Psi_{yy} \to -l^2\,G, \quad y\,\Psi_{yy} \to -i\left(l^2\,G\right)_l. \qquad (37)$$

Первые три формулы в этой записи – это свойства преобразования Фурье производной, которые широко известны. Последняя же формула – это частный случай равенства (21) в монографии [9]. Несмотря на известность этой формулы, ее практическое применение в прикладных задачах отсутствует. В нашей работе делается акцент именно на практическом применении этой последней формулы из записи (37).

Подставим интеграл (36) в уравнение (34) и, принимая во внимание (37), для Фурье-образа G получаем следующее уравнение:

$$G_{zz} - \frac{l^2 z^2}{L_z^2}G - i\frac{l^2}{L_y}G_l = 0. \qquad (38)$$

Равенство (38) не является уравнением с разделяющимися переменными. Чтобы оно стало таковым, выполним следующую замену переменных

$$(z, l) \to (\eta, \varphi),$$

где

$$\eta = \frac{z\,l^{1/2}}{L_z^{1/2}}, \quad \varphi = 1. \qquad (39)$$

Якобиан такой замены имеет вид

$$\frac{\partial\left(\eta, \varphi\right)}{\partial\left(z, l\right)} = l^{1/2}. \qquad (40)$$

Следует отметить, что в уравнениях (39) и (40) фигурирует $l^{1/2}$. Технически именно этот факт и позволяет рассматривать только одну из частей интеграла Фурье. Для простоты мы выбрали сначала верхнюю, положительную часть интегрирования, с тем чтобы снять вопрос, относящийся к квадратному корню.

Здесь возникает вопрос, почему следует выбрать именно такую замену переменных. Ответ содержится в работе [17], где построено решение в ВКБ-приближении. Фактически оказываются лишними какие-либо рассуждения об автомодельности, так как в определенном смысле вся автомодельность решения сводится к простой замене переменных вида (39).

В новых переменных (η, φ) равенство (38) принимает вид уравнения с разделяющимися переменными:

$$G_{\eta\eta} - \eta^2 G - i\frac{\eta L_z}{2L_y}G_\eta - i\frac{\varphi L_z}{L_y}G_\varphi = 0. \tag{41}$$

И в таком случае ищем решение с разделяющимися переменными:

$$G(\eta,\varphi) = H(\eta)F(\varphi). \tag{42}$$

Для функции $H(\eta)$ получаем следующее уравнение:

$$H_{\eta\eta} - i\frac{\eta L_z}{2L_y}H_\eta - \left(\eta^2 + \mu_0\right)H = 0, \tag{43}$$

где μ_0 – постоянная разделения.

Далее слагаемое с первой производной в уравнении (43) убираем следующей заменой:

$$H(\eta) = P(\eta)\exp\left(i\frac{L_z}{8L_y}\eta^2\right). \tag{44}$$

Для функции $P(\eta)$ получаем следующее уравнение:

$$P_{\eta\eta} + \left[-\eta^2\left(1 - \frac{L_z^2}{16L_y^2}\right) - \mu_0 + i\frac{L_z}{4L_y}\right]P = 0. \tag{45}$$

Напомним, что мы ищем решения, локализованные в окрестности уровня $z = 0$. Анализ уравнения (45) позволяет заключить, что коэффициент при η^2 должен быть положительным, поэтому мы получаем следующее условие существования локализованных решений:

$$\left(1 - \frac{L_z^2}{16L_y^2}\right) > 0 \Leftrightarrow 0 < \left|L_z\right| < 4\left|L_y\right|. \tag{46}$$

Условие (46) означает, что ветви параболы, которая ограничивает внутреннюю область прозрачности от внешней области тени, должны быть практически параллельны друг другу. В противном случае вертикальная мода не сформируется и волна не будет приближаться к критической точке бесконечно долго. Важно отметить, что если условие (46) не выполняется, то формально возможны и другие режимы трансформации решения. Ни о какой единственности решения здесь речи не идет.

Оценка параметров для внутренних волн показывает, что если принять масштабы, которые использовали авторы работы [13], то получается очень хорошая разница данных величин ($L_z < 4L_y$), а это свидетельствует об оправданности концепции параболической ловушки с физической точки зрения.

Определим квантовые значения переменной разделения μ_0 [10, 16]:

$$-(2m+1) = \left(\mu_0 - i\frac{L_z}{4L_y}\right)\Bigg/\left(1 - \frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/2}, \quad m = 0, 1, 2, \ldots\,. \tag{47}$$

Отсюда можно найти собственные значения

$$\mu_0=\frac{L_z}{L_y}\left[\frac{1}{4}i-\frac{\delta}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\right];\quad \delta\equiv\left(\frac{16L_y^2}{L_z^2}-1\right)^{1/2},\quad m=0,1,2,\ldots \tag{48}$$

и собственные функции

$$P(\eta)=\left\{\sum_{m=0}^{\infty}H_m\left[\eta\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/4}\right]\right\}\exp\left[-\frac{\eta^2}{2}\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/2}\right],\quad m=0,\ 1,\ 2,\ldots, \tag{49}$$

где H_m — полиномы Эрмита.

Перейдем теперь к определению второго множителя $F(\varphi)$ в решении (42). Из формулы (41) получаем следующее уравнение:

$$-i\frac{\varphi L_z}{L_y}F_\varphi+\mu_0F=0. \tag{50}$$

Решение уравнения (50) имеет следующий вид:

$$F(\varphi)=\varphi^\mu,\ \ \mu\equiv-i\mu_0\frac{L_y}{L_z}. \tag{51}$$

Окончательно получаем следующие собственные значения:

$$\mu=\frac{1}{4}+i\frac{\delta}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right). \tag{52}$$

Подставляя все найденные составные решения в исходный интеграл (36), находим собственные функции:

$$\begin{gathered}\Psi(k,y,z,\omega)=A(k,\omega)\sum_{m=0}^{\infty}\int_0^{\infty}l^{\mu}\left\{H_m\left[\frac{z\,l^{1/2}}{L_z^{1/2}}\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/4}\right]\right\}\times\\ \times\exp\left[-\frac{z^2l}{2L_z}\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/2}\right]\cdot\exp\left[i\,l\left(y+\frac{z^2}{8L_y}\right)\right]dl,\end{gathered} \tag{53}$$

где $A(k,\ \omega)$ — некоторая константа, определяющая спектральную плотность начального состояния.

Далее полученные собственные функции (53) можно с помощью несложных преобразований свести к вырожденной гипергеометрической функции от некоторого комплексного аргумента. Отметим, что именно интегральная запись (53) является предпочтительной для нахождения асимптотик собственных функций. Несмотря на то, что построенные собственные функции (53) выражают зависимость от двух физических переменных (z и y), интеграл для собственных функций является одномерным, что позволяет воспользоваться методом стационарной фазы [16].

Запишем мнимую часть интеграла (53) в следующем виде:

$$\exp\left[i\,l\left(y+\frac{z^2}{8L_y}\right)+i\frac{\delta}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\ln l\right]. \tag{54}$$

Если продифференцировать это выражение по переменной l и приравнять нулю выражение в квадратных скобках, то получим уравнение для точки l_c:

$$y+\frac{z^2}{8L_y}=-\frac{\delta}{2l_c}\left(m+\frac{1}{2}\right). \tag{55}$$

Перепишем это соотношение в следующем виде:

$$l_c = -\frac{\delta\left(m+\dfrac{1}{2}\right)}{2\left(y+\dfrac{z^2}{8L_y}\right)}. \tag{56}$$

Полученное выражение (56) – это некое обобщение коротковолновой ВКБ-асимптотики дисперсионного соотношения $l_c = y^{-1}$. Тогда вторая производная фазы по волновому числу пропорциональна l_c^{-2}, и, следовательно, корень в минус первой степени из этой производной пропорционален l_c^1.

Асимптотика собственных функций в окрестности критической точки принимает следующий вид:

$$\begin{gathered}\Psi_1(k,y,z,\omega) = A(k,\omega)\sum_{m=0}^{\infty} l_c^{\mu+1}\left\{H_m\left[\frac{z\,l_c^{1/2}}{L_z^{1/2}}\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/4}\right]\right\}\times \\ \times\exp\left[-\frac{z^2 l_c}{2L_z}\left(1-\frac{L_z^2}{16L_y^2}\right)^{1/2}\right]\cdot\exp\left[i\,\frac{\delta}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\right].\end{gathered} \tag{57}$$

Анализ этого равенства позволяет заключить, что асимптотика решения эталонного уравнения в точности совпадает с ВКБ-решением [17], выраженным вертикальной модой в виде полиномов Эрмита, мажорированных гауссовской функцией, и дает классическую степень 5/4 для амплитуды вертикальной скорости. Если авторы работы [13] и имеют в виду некую моду, то мы с уверенностью утверждаем, что это не их вертикальная мода в виде ВКБ-решения по вертикальной координате, а совсем другая, которая построена в работе [17].

Построенные нами решения представляют собой функции не от переменных z, y, а от некоторых криволинейных переменных, имеющих следующий вид:

$$(y,z)\to\left(y+\frac{z^2}{8L_y},\quad \frac{z}{\left(y+\dfrac{z^2}{8L_y}\right)^{1/2}}\right). \tag{58}$$

Таким образом, происходит в некотором смысле искривление пространства в окрестности фокальной точки. Но вся эта «криволинейность» просматривалась и при решении задачи в ВКБ-приближении, где формально происходила следующая замена переменных:

$$(y,z)\to\left(y,\frac{z}{\sqrt{y}}\right).$$

Поэтому, по большому счету, асимптотики одномерных интегралов не дают каких-либо качественно новых результатов, отличных от ВКБ-решений, за исключением условия (47), которое выполняется с большим запасом.

Приведение интеграла Фурье к гипергеометрической функции от комплексного переменного. Для сравнения нашего решения с решением Н. С. Ерохина и Р. З. Сагдеева [13] перепишем собственные функции (54) в следующем виде:

$$\Psi_m(k,y,z,\omega) = \int_0^{\infty} l^{\mu} H_m\left(\frac{z\,l^{1/2}}{2L_y^{1/2}}\delta^{1/2}\right)\cdot\exp\left(-\frac{z^2 l}{8L_y}\delta\right)\cdot\exp\left[il\left(y+\frac{z^2}{8L_y}\right)\right]dl. \tag{59}$$

Затем сделаем замену переменных ($l \to x$), а аргумент

$$\left(\frac{z\, l^{1/2}}{2L_y^{1/2}} \delta^{1/2} \right)$$

полинома Эрмита примем за новую переменную

$$x = \frac{z l^{1/2} \delta^{1/2}}{2L_y^{1/2}}. \tag{60}$$

Из этого следует, что

$$\Psi_m \propto \int_0^\infty \exp\left(-2ax^2\right) \frac{x^{2\mu+1}}{z^{2\mu+2}} H_m(x)\, dx. \tag{61}$$

В формуле (60) появилась комплексная переменная $2a$, зависящая от двух пространственных физических переменных – z и y:

$$2a = \frac{1}{2} - i\frac{1}{2\delta z^2}\left(z^2 + 8\, y\, L_y\right). \tag{62}$$

Двумерную задачу мы решили через одномерный интеграл, но только от комплексного аргумента. Нетрудно видеть, что

$$\frac{1}{2a} = \frac{2\delta z^2}{\delta z^2 - i\left(z^2 + 8\, y\, L_y\right)} \equiv \tau^*, \tag{63}$$

где τ – комплексная переменная Н. С. Ерохина и Р. З. Сагдеева [13] (звездочка означает комплексное сопряжение).

Интегральное представление гипергеометрической функции через полиномы Эрмита имеет следующий вид [11, формулы 7.37, 7.38, см. «Список литературы» на русском языке]:

$$F\left(-n; \frac{\nu+1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2a}\right) \sim \int_0^\infty \exp\left(-2ax^2\right) x^\nu H_{2n}(x)\, dx, \tag{64}$$

где Re $a > 0$, Re $\nu > -1$;
кроме того [11, ф-ла 7.376.3]:

$$F\left(-n; \frac{\nu}{2}+1; \frac{3}{2}; \frac{1}{2a}\right) \sim \int_0^\infty \exp\left(-2ax^2\right) x^\nu H_{2n+1}(x)\, dx, \tag{65}$$

где Re $a > 0$, Re $\nu > -2$.

С учетом собственных значений (48) находим:

$$\nu = 2\mu + 1 = \frac{3}{2} + i\delta\left(m + \frac{1}{2}\right). \tag{66}$$

Следовательно, построенные решения регулярны, а интегралы сходятся. Сходство с решением Ерохина и Сагдеева [13] достигнуто по трем из четырех параметров. Определяем последний параметр гипергеометрической функции:

$$\frac{\nu}{2} + 1 = \frac{7}{4} + i\frac{\delta}{2}\left(m + \frac{1}{2}\right) \equiv \gamma^*, \tag{67}$$

где γ – квантовый параметр из этой работы [1, формула (2.7)].

Аналогично находим, что

$$\frac{\nu+1}{2} = \frac{5}{4} + i\frac{\delta}{2}\left(m + \frac{1}{2}\right). \tag{68}$$

Таким образом мы получили полное соответствие наших результатов с работой [13]. Если учесть вторую часть интеграла Фурье, для отрицательных волновых чисел, то через замену переменной его можно свести к интегралу по положительным волновым числам. Но тогда в исследуемом интеграле произойдет замена у мнимой единицы ($i \to -i1$), а это приведет к появлению второй части решения, где вместо τ и γ будут фигурировать комплексно-сопряженные τ^* и γ^*.

Тем самым общее решение задачи есть сумма решений от τ и τ^*, что физически равносильно сумме падающей и отраженной волн. Это означает, что математически нет запрета на отражение и версия о бесконечной фокусировке сильно преувеличена.

Обсуждение и выводы

В данном исследовании изложены основные сведения по операторному методу преобразования Фурье, которые необходимы для практического решения конкретных физических задач в неоднородных средах. Основные свойства выводятся двумя способами:

интегрированием по частям, что предполагает затухание функций на бесконечности;

дифференцированием по параметру прямого или обратного преобразования Фурье.

На пяти конкретных примерах мы показали, как работает Фурье-анализ в неоднородных средах. В первых четырех примерах построены формальные интегральные решения, так как их дальнейший анализ хорошо известен и читатель с этим может самостоятельно ознакомиться, используя указанные ссылки. Отметим, что обычно эти интегралы (см. Примеры 1 и 2) приводятся без вывода и читателю предлагается самостоятельно получить этот вывод с помощью преобразования Лапласа. В нашей работе мы построили интегральные решения с помощью преобразования Фурье и теоремы Коши, показав их равнозначность с преобразованием Лапласа в одномерных неоднородных задачах.

В Примерах 2, 3 и 4 рассматривается двумерная задача, в которой неоднородность среды носит одномерный линейный характер. В Примере 2 решение можно получить двумя способами: через преобразование Фурье и через преобразование Лапласа. В Примере 5 мы выполнили полный анализ краевой задачи. Мы построили интеграл Фурье, нашли его двумерные асимптотики с помощью метода стационарной фазы и свойств параболического квантового осциллятора и также провели идентификацию найденного интеграла Фурье, сведя его к известной вырожденной гипергеометрической функции от комплексного аргумента. Тем самым мы показали, что утверждение о неработоспособности Фурье-анализа в неоднородных средах является ошибочным.

Таким образом, в терминах интеграла Фурье мы аналитически доказали идентичность решения эталонного уравнения для вертикальной фокусировки монохроматической волны в окрестности фокуса с решением эталонного уравнения в терминах вырожденной гипергеометрической функции от комплексного переменного, полученного в предыдущих исследованиях. Данное математическое решение успешно применяется также в задачах магнитогидродинамической неустойчивости и при описании внутренних гравитационных волн в двумерно-неоднородной жидкости [7, 13].

Показано, что вопрос о поглощении волн в фокальной зоне носит неоднозначный характер и поэтому может наблюдаться как прохождение, так и отражение от особенности. Конкретные оценки для типичных параметров океанических градиентов гидрофизических полей плотности и скорости показывают, что локализация, и, как правило, усиление волновых движений вполне реализуемы и будут проявляться в виде сильно локализованных пространственных вихревых образований.

Указанные особенности следует учитывать при исследовании геофизических полей, в частности при анализе мезомасштабной вихревой динамики в океане.

Аналитический метод, изложенный в данных пяти примерах, может быть использован при решении и других задач математической физики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Уизем Дж.** Линейные и нелинейные волны. Пер. с англ. М.: Мир, 1977. 606 с.

2. **Лайтхилл Д.** Волны в жидкостях. Пер. с англ. М.: Мир, 1981. 598 с.

3. **Педлоски Дж.** Геофизическая гидродинамика. В 2 тт. М.: Мир, 1984. 398 с. (том 1), 416 с. (том 2).

4. **Wirth V., Riemer M., Chang E. K., Martius O.** Rossby wave packets on the midlatitude waveguide. A review // Monthly Weather Review. 2018. Vol. 146. No. 7. Pp. 1965–2001.

5. **Титчмарш Э. Ч.** Введение в теорию интегралов Фурье. Пер. с англ. Москва, Ленинград: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1948. 419 с.

6. Вопросы теории плазмы. Сб. статей. Выпуск 7. Под ред. акад. М. А. Леонтовича, М.: Атомиздат, 1973. 304 с.

7. **Ерохин Н. С., Моисеев С. С.** Вопросы теории линейной и нелинейной трансформации волн в неоднородных средах // Успехи физических наук. 1973. Т. 109. № 2. С. 225—258.

8. **Wasow W.** A study of the solutions of the differential equation $y^{(4)} + \lambda^2 (xy'' + y) = 0$ for large values of λ // The Annals of Mathematics. 1950. Vol. 52. No. 2. Pp. 350—361.

9. **Владимиров В. С., Жаринов В. В.** Уравнения математической физики. 2-е изд. М.: Физматлит, 2004. 400 с.

10. **Гневышев В. Г., Белоненко Т. В.** Парадокс Россби и его решение // Гидрометеорология и экология (Ученые записки РГГМУ). 2020. № 61. С. 480—493.

11. **Градштейн И. С., Рыжик И. М.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. 7-е изд. СПб: БХВ-Петербург, 2011, 1232 с.

12. **Евграфов М. А.** Аналитические функции. 4-е изд. СПб.: Изд-во «Лань», 2008. 448 с.

13. **Ерохин Н. С., Сагдеев Р. З.** К теории аномальной фокусировки внутренних волн в двумерно-неоднородной жидкости. Часть 1. Стационарная задача // Морской гидрофизический журнал. 1985. № 2. С. 15—27.

14. **Камке Э.** Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. Пер. с нем. 6-е изд. М.: Наука: Гл. ред. физ-мат. лит., 2003. 576 с.

15. **Миропольский Ю. З.** Динамика внутренних гравитационных волн в океане. Ленинград: Гидрометеоиздат, 1981. 301 с.

16. **Badulin S. I., Shrira V. I.** On the irreversibility of internal-wave dynamics due to wave trapping by mean flow inhomogeneities. Part 1. Local analysis // Journal of Fluid Mechanics. 1993. Vol. 251. June. Pp. 21—53.

17. **Badulin S. I., Shrira V. I., Tsimring L. Sh.** The trapping and vertical focusing of internal waves in a pycnocline due to the horizontal inhomogeneities of density and currents // Journal of Fluid Mechanics. 1985. Vol. 158. September. Pp. 199—218.

18. **Gnevyshev V. G., Badulin S. I., Belonenko T. V.** Rossby waves on non-zonal currents: Structural stability of critical layer effects // Pure and Applied Geophysics. 2020. Vol. 177. No. 11. Pp. 5585—5598.

19. **LeBlond P. H., Mysak L. A.** Waves in the ocean. Elsevier oceanography series. Amsterdam: Elsevier Scientific Publishing Company, 1981. 602 p.

20. **Yamagata T.** On trajectories of Rossby wave-packets released in a lateral shear flow // Journal of the Oceanographic Society of Japan. 1976. Vol. 32. No. 4. Pp. 162—168.

REFERENCES

1. **Witham G. B.,** Linear and nonlinear waves (Series: Pure and Applied Mathematics), Willey, New York, 1974.

2. **Lighthill J.,** Waves in fluids, 2-nd Ed., Cambridge University Press, New York, 1978.

3. **Pedlosky J.,** Geophysical fluid dynamics, Springer Verlag, New York, 1978.

4. **Wirth V., Riemer M., Chang E. K., Martius O.,** Rossby wave packets on the midlatitude waveguide. A review, Mon. Weather Rev. 146 (7) (2018) 1965—2001.

5. **Titmarsh E. C.,** Introduction to the theory of Fourier integrals, 3d Ed., Chelsea Publishing Company, New York, 1986.

6. Reviews of plasma physics, Vol. 7, Ed. by M. A. Leontovich, Consulting Bureau, USA, 1979.

7. **Erokhin N. S., Moiseev S. S.,** Problems of the theory of linear and nonlinear transformation of waves in inhomogeneous media, Soviet Physics Uspekhi. 16 (1) (1973) 64—81.

8. **Wasow W.,** A study of the solutions of the differential equation $y^{(4)} + \lambda^2 (xy'' + y) = 0$ for large values of λ, Ann. Math. 52 (2) (1950) 350—361.

9. **Vladimirov V. S., Zharinov V. V.,** Uravneniya matematicheskoy fiziki [The equations of mathematical physics], Fizmatlit Publishing, Moscow, 2004 (in Russian).

10. **Gnevyshev V. G., Belonenko T. V.,** The Rossby paradox and its solution, Hydrometeorology and Ecology (Proceedings of the Russian State Hydrometeorological University). (61) (2020) 480—493 (in Russian).

11. **Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M.,** Table of integrals, series, and products, Ed. by A. Jeffrey, D. Zwillinger, Academic Press, Cambridge, USA, 2015.

12. **Evgrafov M. A.,** Analytical functions, Dover Publications, New York, 1978.

13. **Erokhin N. S., Sagdeev R. Z.,** To the theory of anomalous focusing of internal waves in a two-dimensional nonuniform fluid. Part I: A stationary problem, Morskoy Gidrofizicheskiy Zhurnal (Soviet J. Phys. Oceanography). (2) (1985) 15–27 (in Russian).

14. **Kamke E.,** Handbook of exact solutions for ordinary differential equations. Ed. by A. D. Polyanin, V. F. Zaitsev, CRC Press, Boca Raton, New York, London, 1995.

15. **Miropol'sky Yu. Z.,** Dynamics of internal gravity waves in the ocean (Book Series "Atmospheric and Oceanographic Sciences Library"), Springer, New York, 2001.

16. **Badulin S. I., Shrira V. I.,** On the irreversibility of internal-wave dynamics due to wave trapping by mean flow inhomogeneities. P. 1. Local analysis, J. Fluid Mech. 251 (June) (1993) 21–53.

17. **Badulin S. I., Shrira V. I., Tsimring L. Sh.,** The trapping and vertical focusing of internal waves in a pycnocline due to the horizontal inhomogeneities of density and currents, J. Fluid Mech. 158 (Sept.) (1985) 199–218.

18. **Gnevyshev V. G., Badulin S. I., Belonenko T. V.,** Rossby waves on non-zonal currents: Structural stability of critical layer effects, Pure Appl. Geophys. 177 (11) (2020) 5585–5598.

19. **LeBlond P. H., Mysak L. A.,** Waves in the ocean, Elsevier Oceanography Ser. Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, 1981.

20. **Yamagata T.,** On trajectories of Rossby wave-packets released in a lateral shear flow, J. Oceanogr. Soc. Japan. 32 (4) (1976) 162–168.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГНЕВЫШЕВ Владимир Григорьевич – *кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института океанологии имени П. П. Ширшова Российской академии наук, Москва, Россия.*
117997, Россия, г. Москва, Нахимовский пр., 36
avi9783608@gmail.com
ORCID: 0000-0001-6654-5570

БЕЛОНЕНКО Татьяна Васильевна – *доктор географических наук, профессор кафедры океанологии Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.*
199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9
btvlisab@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-4608-7781

THE AUTHORS

GNEVYSHEV Vladimir G.
Shirshov Institute of Oceanology, RAS
36 Nakhimovskiy Ave., Moscow, 117997, Russia
avi9783608@gmail.com
ORCID: 0000-0001-6654-5570

BELONENKO Tatyana V.
St. Petersburg State University
7-9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia
btvlisab@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-4608-7781

Статья поступила в редакцию 30.03.2023. Одобрена после рецензирования 02.08.2023. Принята 02.08.2023.
Received 30.03.2023. Approved after reviewing 02.08.2023. Accepted 02.08.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья
УДК 538.93, 536.241
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16409

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В НАНОСТРУКТУРАХ

К. Р. Трофимович, П. Г. Габдуллин, А. В. Архипов ✉

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ arkhipov@rphf.spbstu.ru

Аннотация. Представлены общая схема и конструкция экспериментальной установки для изучения термоэлектрических явлений в точечных контактах разнородных материалов и в наноструктурах. Точеные контакты регулируемого размера формируются с помощью атомно-силового микроскопа, определяются зависимости термоэдс от разности температур и от силы воздействия зонда на образец. Проведено численное моделирование распределения температуры в такой системе для различных условий, оценено влияние воздушной среды и жидкого слоя, формирующегося на поверхностях в условиях естественной атмосферы. Моделирование показало, что это влияние не является существенным, что делает необязательным проведение экспериментов в высоком вакууме.

Ключевые слова: термоэлектрический эффект, точечный контакт, наноструктуры, нанотеплофизика, атомно-силовой микроскоп

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10027 (https://rscf.ru/project/23-29-10027/) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 23-29-10027.

Для цитирования: Трофимович К. Р., Габдуллин П. Г., Архипов А. В. Экспериментальная установка для исследования особенностей термоэлектрического эффекта в наноструктурах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 101–117. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16409

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16409

AN EXPERIMENTAL APPARATUS FOR STUDYING THE CHARACTERISTICS OF THERMOELECTRIC EFFECT IN NANOSTRUCTURES

K. R. Trofimovich, P. G. Gabdullin, A. V. Arkhipov ✉

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

✉ arkhipov@rphf.spbstu.ru

Abstract. We present an experimental setup for the study of thermoelectric effect in point contacts between different materials and in nanostructures. Point contacts of controlled size are formed with the use of an atomic force microscope (AFM), thermopower dependences against the temperature drop and against the contact spot size determined from the force applied to the probe. Computer simulations of heat transport in the system were performed to evaluate influence of atmospheric air and of a liquid layer covering solid surfaces in the atmospheric conditions onto temperature distributions. This influence was found to be insubstantial, which makes it possible to conduct experiments on the atmosphere and not in high vacuum.

Keywords: thermoelectric effect, point contact, nanostructures, atomic force microscope

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-29-10027 (https://rscf.ru/project/23-29-10027/) and by St. Petersburg Science Foundation (Grant No. 23-29-10027).

For citation: Trofimovich K. R., Gabdullin P. G., Arkhipov A. V., An experimental apparatus for studying the characteristics of thermoelectric effect in nanostructures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 101–117. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16409

Введение

Проблема повышения энергоэффективности становится все более актуальной для электроники. Сообщалось, в частности, что более 10 % электроэнергии в мире уже сейчас потребляется компьютерами и телекоммуникационным оборудованием, и эта доля быстро растет [1]. Потребляемая электронными устройствами энергия в конечном итоге выделяется в виде тепла, и обратное преобразование части этого тепла в электроэнергию могло бы заметно повысить общую энергоэффективность. Наиболее естественным способом утилизации тепловой энергии электронных компонентов представляется использование твердотельных термоэлектрических генераторов (ТЭГ). Разработка и совершенствование ТЭГ ведется в течение многих лет (по меньшей мере, с 40-х гг. XX века), и успехи здесь весьма значительны. Однако на пути повышения эффективности ТЭГ имеются фундаментальные физические ограничения.

Термоэлектрические материалы принято оценивать параметром термоэлектрической эффективности (качества) Z или, чаще, одноименной безразмерной величиной ZT, где T – абсолютная температура. Этот параметр характеризует отличие кпд термоэлектрического преобразования, достижимого с использованием данного материала, от кпд идеальной тепловой машины. Зависимость термоэлектрической эффективности от свойств материала задается формулой [1 – 4]:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_{el} + \kappa_{ph}}, \tag{1}$$

где S – коэффициент Зеебека (определяется как коэффициент пропорциональности между термоэдс и перепадом температуры); σ – электрическая проводимость; κ_{el}, κ_{ph} – электронная и решеточная (фононная) составляющие коэффициента теплопроводности.

По имеющимся оценкам, широкое использование ТЭГ в энергетике окажется экономически оправданным при достижении $ZT = 3 - 4$. Полученные к настоящему времени значения ZT лучших термоэлектрических материалов (в частности, теллурид висмута Bi_2Te_3) при комнатной температуре близки к единице. Из формулы (1) очевидно, что для повышения термоэлектрического качества следует добиваться уменьшения теплопроводности материала и увеличения его электропроводности и коэффициента Зеебека. Металлы, обладая высокой электропроводностью, не являются оптимальными материалами для ТЭГ, поскольку значения коэффициента Зеебека у них невелики: в большинстве случаев не превышают по модулю 10 мкВ/К. Кроме того, поток тепла в металлах переносится преимущественно носителями электрического заряда, вследствие чего коэффициенты тепло- и электропроводности металлов, стоящие в формуле (1) в знаменателе и в числителе соответственно, пропорциональны друг другу (закон Видемана – Франца), что затрудняет оптимизацию параметра ZT. В противоположность этому, полупроводники обладают низкой электронной теплопроводностью, а тепловой поток в них переносится почти исключительно фононами. Коэффициент Зеебека полупроводящих материалов, как правило, достаточно велик (сотни мкВ/K), что определяется значительными вариациями функции энергетической плотности состояний электронов вблизи уровня Ферми [3 – 5]. Термоэлектрические свойства полупроводников можно оптимизировать выбором степени их легирования [6, 7] или смещением уровня Ферми иными способами [8]. В целом, полупроводники характеризуются наилучшими термоэлектрическими параметрами среди однородных объемных материалов, однако возможности их радикального совершенствования все же ограничены.

В последние десятилетия перспективы создания коммерчески успешных термоэлектрических устройств связывают с наноструктурами и наноструктурированными материалами. Многие эксперименты (см., например, статьи [9 – 12]) принципиально подтвердили теоретические предсказания, сделанные авторами работ [4, 13], о возможности использования размерных эффектов для селективного уменьшения теплопроводности за счет рассеяния фононов границами и дефектами при меньшем их влиянии на электропроводность.

Не менее перспективным считается путь использования в термоэлектрических устройствах наночастиц, отдельных молекул или молекулярных слоев [2, 3, 12 – 16], обладающих дискретным спектром разрешенных электронных состояний, который можно оптимизировать для достижения высоких значений S и ZT. Разрабатываются наноструктуры, где есть возможность создать условия одновременно для деструктивной интерференции возбуждений решетки и конструктивной интерференции электронных волн [1, 2]. Расчет термоэлектрических параметров устройств, использующих наноразмерные элементы, представляет собой сложную задачу, что повышает роль эксперимента в таких исследованиях.

Постановка задачи исследования

В данной работе представляются результаты первого, начального этапа нового исследовательского проекта, цель которого состоит в экспериментальной проверке одной из теоретических моделей, предсказывающих возможность построения ТЭГ с повышенной эффективностью на основе использования особенностей переноса тепла и термоэлектрических явлений в наноструктурах на основе углерода.

Углерод в состоянии sp^2-гибридизации (однослойный и многослойный графен, углеродные нанотрубки, графит) обладает уникальными характеристиками [4, 17, 18]: низкой эффективной массой носителей заряда, высокой теплопроводностью, высоким коэффициентом поглощения оптического излучения. Электронные свойства графена и углеродных нанотрубок легко модифицируются не только легированием и дефектами, но и электрическим полем, что делает углерод в состоянии sp^2-гибридизации перспективным материалом электроники. Среди прочего, рассматривалась и возможность его использования в составе термоэлектрических устройств [5, 19].

Е. Д. Эйдельман, автор работ [20, 21], предложил конструкцию ТЭГ на основе структуры из нанометровых слоев алмазоподобного и графитоподобного углерода. Принцип ее действия базируется на предложенной им ранее теоретической модели [22, 23], которая обосновывает возможность получения повышенных значений коэффициента Зеебека S и параметра ZT при использовании явления увлечения носителей заряда баллистическим потоком фононов, причем даже при комнатной и более высокой температуре. В этом случае для достижения положительного результата требуется локализация электрического поля и перепада температуры в плоском нанослое sp^2-углерода, где поток фононов остается баллистическим. Алмазоподобный слой играет роль «холодильника», отводя неиспользованную часть этого потока. В качестве необходимого условия указывается также наличие резких (не более нескольких периодов решетки) межфазных границ. На наш взгляд, экспериментальная демонстрация предсказанного эффекта в статье [21] была не вполне убедительной. Причиной этого, вероятно, стала объективная технологическая сложность формирования идеальной структуры, требуемой теорией; наличие дефектов, практически неизбежное при указанных значениях толщины и площади, могло приводить к электрическому закорачиванию реальной структуры и снижению регистрируемого для нее термоэлектрического напряжения.

Наше исследование нацелено на проведение экспериментальной проверки работоспособности концепции, предложенной в статьях [20, 21], с использованием более простой в реализации структуры, основной частью которой может являться, например, углеродный наноостровок на поверхности кремниевой подложки (служащей в данном случае холодильником или, наоборот, нагревателем). Второй термический и электрический контакт с островком должен устанавливаться посредством зонда атомно-силового микроскопа (АСМ). Островковые углеродные пленки требуемой структуры изучались нами ранее в связи с их способностью к эмиссии электронов [24 – 26].

Достоинством предлагаемого подхода является возможность проведения оперативного независимого тестирования термоэлектрических свойств многих островков, которые различаются размерами и свойствами интерфейса с подложкой. Это кажется необходимым, поскольку мы ожидаем, что высокую термоэлектрическую эффективность покажут лишь немногие из островков.

Такие ожидания связаны с важными особенностями, привносимыми тепловыми контактами малых латеральных размеров.

Известно явление снижения термоэдс в наноконтактах [27 – 30], которое объясняют как раз подавлением фононного увлечения носителей заряда. Его причину видят в рассеянии неравновесных фононов на «апертуре» наноконтакта, что снижает вероятность передачи их импульса электронам или дыркам. Поэтому, согласно теории, изложенной в статье [27], при малых диаметрах d контакта, в формуле для термоэдс увлечения появляется дополнительный множитель d/Λ_p, где Λ_p – длина пробега фонона.

В планируемых экспериментах предполагается исследование островков, высота которых имеет порядок длины пробега фонона, приближенно равной 5 нм (согласно оценке в статье [21]). Их латеральный размер будет в несколько раз большим, но размер контакта с зондом АСМ может оказаться малым и плохо контролируемым.

Однако граничное рассеяние фононов, по мнению многих исследователей, является лишь одной из причин зависимости коэффициента Зеебека и других кинетических коэффициентов от размера области контакта. В частности, теорией предсказывается и уже экспериментально наблюдалось отклонение кинетических зависимостей от линейного вида при нарушении условия $L_T > \Lambda_p$, где L_T – расстояние, на котором температура меняется существенным образом; его можно определить, например, как

$$L_T^{-1} = \max\left(\frac{|\text{grad}\,T|}{T}\right). \tag{2}$$

Причину этого явления видят в нелокальности взаимодействия носителей заряда с решеткой [31 – 37]. При нарушении условия $L_T > \Lambda_p$ нельзя считать, что взаимодействие происходит в точке с определенными координатами. Зачастую при этом и значение температуры нельзя корректно определить, поскольку распределения фононов и носителей заряда оказываются существенно неравновесными [5, 38]. Одно из проявлений нелокальности – это зависимость величины термоэдс не только от приложенной разности температур, но и от ее профиля распределения, от максимальной величины ее градиента, т. е. от характеристик, которые едва ли можно предсказать для теплового контакта зонда с островком.

Еще одной областью со свойствами, сильно изменяющимися от островка к островку, может оказаться область интерфейса с подложкой, поскольку островки формировались на слое естественного оксида; хотя в литературных источниках [30, 39, 40] и утверждается, что тонкие промежуточные слои не оказывают влияния на результаты измерения термоэлектрических параметров покрытий и наноструктур.

По указанным причинам, надежная регистрация факта получения высоких значений коэффициента Зеебека (в статье [21] оценка его ожидаемой величины составляет 50 мВ/К) хотя бы для небольшой части углеродных наноостровков (или других аналогичных тестируемых объектов), приводимых в контакт с имеющим отличную температуру зондом АСМ, может рассматриваться как подтверждение теоретических предсказаний работ [20 – 23] и станет стимулом для последующих работ по практической реализации концепции ТЭГ, предлагаемой в работе [21].

Экспериментальная установка

Экспериментальная установка для решения вышеописанной задачи создается на базе АСМ NanoDST (Pacific Nanotechnology, США). Такой подход не стоит считать новым: схемы на основе зондовых микроскопов с успехом использовались в аналогичных исследованиях, в частности, для картирования распределений тепловых и термоэлектрических параметров [5, 6, 39 – 44] и при изучении свойств молекулярных слоев и отдельных молекул [1, 5, 16, 39, 45]. Особенностями создаваемой установки являются минимальные доработки серийного АСМ и использование при ее работе стандартных АСМ-зондов, что возможно, поскольку на начальном этапе исследований будет решаться ограниченный круг задач.

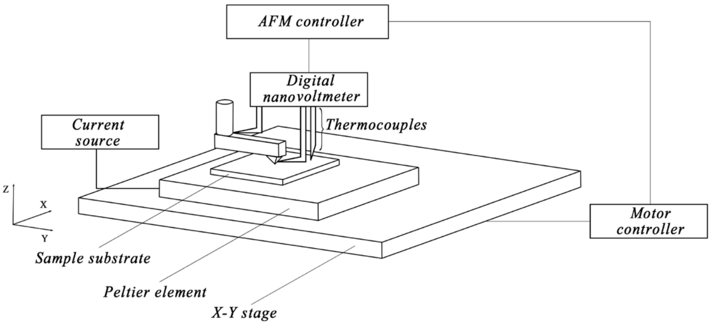


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Массивный координатный столик (*X*-*Y* stage) и держатель зонда играют роль термостатов с температурой, равной температуре окружающей среды T_0. Подложка изучаемого образца (Sample substrate) размещается на верхней поверхности элемента Пельтье (Peltier element), температура которой поддерживается (с помощью питающего элемент источника тока (Current source)) на заданном значении $T = T_0 + \Delta T$. Значения температуры контролируются при помощи термопар (Thermocouples). В ходе опыта зонд АСМ, начальная температура которого равна T_0, приводится в контакт с точкой образца, выбранной в ходе предварительного сканирования его поверхности. Формирующееся при контакте термоэлектрическое напряжение регистрируется цифровым вольтметром (Digital nanovoltmeter), синхронизованным с контроллером АСМ (AFM controller). Одновременная регистрация его показаний и «кривой подвода» АСМ (*англ.* force-distance) позволит определить зависимость термоэлектрического напряжения от силы взаимодействия зонда с поверхностью, а значит, и от размера d области их контакта. Для выделения составляющей напряжения, связанной с контактной разностью потенциалов, эксперимент будет проводиться и для $\Delta T = 0$.

Задача определения чисто тепловых параметров – величин тепловых потоков, тепловых сопротивлений, теплопроводимости и теплопроводности – с точки зрения техники измерений представляет обычно наибольшую сложность [38, 46, 47]. На данном этапе исследований мы отказались от их определения, поскольку для оценки релевантности концепции ТЭГ, предложенной в работе [21], достаточно нахождения максимальных значений коэффициента Зеебека S, т. е. измерений температуры и термоэдс. В случае обнаружения воспроизводимых зависимостей $S(\Delta T)$ и $S(d)$, получаемые результаты дадут дополнительную информацию о физике процессов переноса тепла и электрического заряда в изучаемой системе.

В дальнейшем планируется расширить возможности установки.

Объекты исследования

Для первых экспериментов были выбраны следующие объекты исследования (ниже они даны в последовательности от простых к более сложным).

Наноконтакт АСМ-зонда с металлической пластиной или толстой пленкой (Cu, Au).

Поскольку значения коэффициента Зеебека для кремния существенно превосходят его значения для металлов, при контакте кремниевого зонда с металлической пластиной естественно ожидать, что величина термоэдс будет в основном определяться процессами в зонде. Таким образом, главная цель таких опытов состоит в определении вклада в термоэдс зондов разного типа: с металлическим покрытием и без покрытия, при разном размере пятна контакта. Такие данные необходимы для проведения последующих экспериментов с другими объектами – для учета вклада АСМ-зонда в регистрируемые значения термоэдс.

Наноконтакт АСМ-зонда с кремниевой пластиной. Измерения термоэлектрических характеристик наноконтактов, формируемых между АСМ-зондами и подложками, весьма важны для корректной интерпретации прочих экспериментальных результатов, так как углеродные наноостровки (это основные объекты экспериментов на данном этапе исследований) сформированы на кремниевых подложках. Однако существует и дополнительная мотивация для проведения таких опытов.

В проведенных ранее экспериментах была зарегистрирована способность к низковольтной полевой эмиссии островковых пленок углерода и металлов (молибден, цирконий, вольфрам), сформированных на кремниевых подложках [24, 25, 48]. Было высказано предположение о важной роли термоэлектрических потенциалов в физическом механизме эмиссионного процесса [26, 48, 49]. При этом отсутствие существенных различий эмиссионных параметров углеродных и металлических островков свидетельствовало в пользу того, что термоэлектрические потенциалы формируются не в самих островках, а в подложках вблизи островков. Теоретическое рассмотрение такого процесса с применением модели увлечения носителей заряда баллистическим потоком фононов [21] позволило дать оценку эффективности термоэлектрического преобразования такой структурой. Результаты этого рассмотрения будут опубликованы позднее, они могут быть важными и в связи с задачами данного исследования. Это определяет дополнительный интерес к результатам планируемого экспериментального тестирования термоэлектрических характеристик наноконтактов металлизированных зондов с кремниевыми подложками.

Следует признать, что свойства точечных контактов кремния уже изучались и ранее, с 1980 – 1990 гг. Однако эти ранние эксперименты проводились преимущественно с контактами микронных и субмикронных размеров (20 – 0,3 мкм) [29, 30, 50], которые формировались между заостренными кромками кремниевых клиньев, прижимаемых друг к другу с силой 1 – 100 мН [50]. Механическое сжатие приводило к появлению существенных деформаций в приконтактной области, которые, по мнению самих авторов работ [30], были способны вызывать дополнительное рассеяние фононов и влиять на распространение потоков тепла. Размер контакта зонда АСМ с плоской поверхностью и силу их взаимодействия можно существенно снизить, чтобы более корректно имитировать контакт подложки со сформированным на ней наноостровком. Паспортное значение упругой постоянной АСМ-зонда типа CSG01 (НТ МДТ, Россия), предназначенного для контактной моды измерений, составляет 0,03 Н/м. На типичной «кривой подвода» зонда АСМ переход от сил притяжения к силам отталкивания (когда устанавливается непосредственный контакт зонда с поверхностью) происходит на дистанции порядка 100 нм [41, 42]. По этим значениям можно оценить силу механического взаимодействия зонда с поверхностью образца как $F \approx 3 \cdot 10^{-9}$ Н. Диаметр пятна контакта d можно вычислить путем решения задачи об упругом взаимодействии сферы радиуса R и плоскости [41]:

$$d = \left(\frac{6FR}{E} \right)^{1/3}, \tag{3}$$

где E – модуль Юнга (для кремния E = 109 ГПа), R – радиус острия зонда.

Для паспортного значения R = 10 нм это дает нам оценку минимального диаметра пятна контакта $d \approx 1{,}2$ нм. При достижении давлением порога пластической деформации (например, для случая металлической пластины) эта величина может несколько возрасти, но заведомо не превысит радиуса острия [41]. Таким образом, размер пятна контакта между зондом АСМ и кремниевой (или металлической) пластиной могут быть сделаны существенно меньшими, чем соответствующие величины, реализованные в классических работах [29, 30, 50]. Сопоставление их результатов может представлять значительный интерес.

Углеродные наноостровки и листки графена (sp^2-углерод). Как уже указывалось выше, термоэлектрические свойства углеродных наноостровков рассматриваются в качестве основного объекта данного исследования. Другим объектом станут листки многослойного графена, имеющие бóльшую площадь интерфейса с подложкой и представляющие собой более близкий аналог предлагаемой в структуры прототипа ТЭГ. Использование АСМ позволяет установить тепловой и электрический контакт с локальной областью отдельного листка многослойного графена и варьировать силу его прижатия к поверхности подложки.

Изображения и профили поверхности образцов естественно окисленных пластин кремния с углеродными наноостровками и листками графена разной площади приведены на рис. 2,*a* – *c*. Они получены с помощью АСМ NanoDST (Pacific Nanotechnology), который планируется использовать и в термоэлектрических экспериментах.

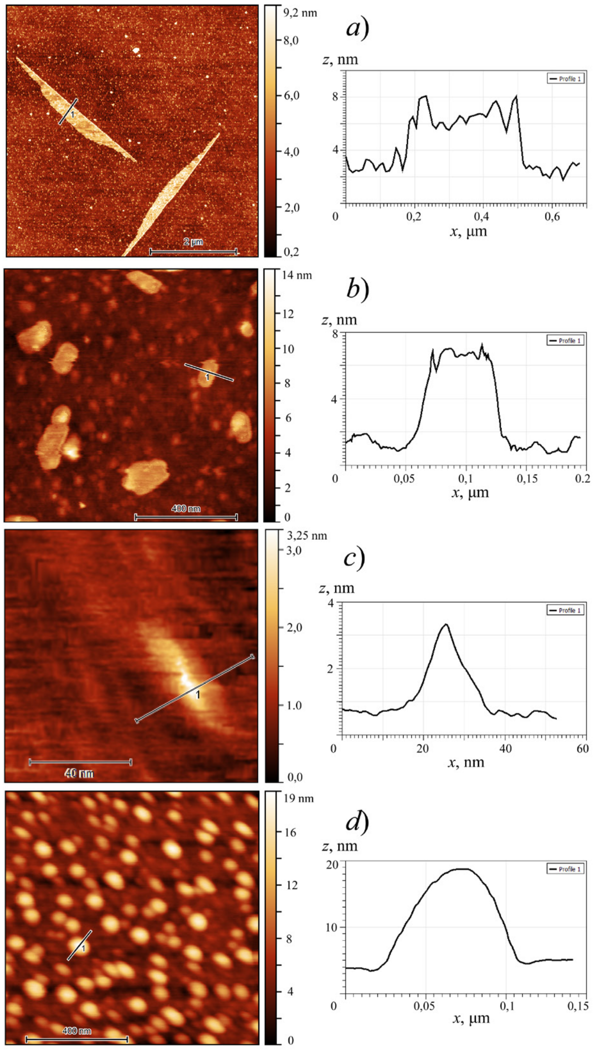


Рис. 2. АСМ-изображения (слева) и профили топографии поверхности нанообъектов (справа) на естественно окисленных кремниевых подложках.

Нанообъекты: листки многослойного графена большого (*a*) и малого (*b*) размеров, малый углеродный наноостровок (*c*) и металлические наночастицы вольфрама (*d*)

Металлические наночастицы. Особенностью наноразмерных частиц в сравнении с объемными материалами является дискретный характер спектра разрешенных состояний. Эта особенность является благоприятной с точки зрения возможности достижения высокой термоэлектрической эффективности. В соответствии с известной формулой Мотта, коэффициент Зеебека определяется величиной производной энергетической плотности состояний на уровне Ферми [4]:

$$S = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e}\left\{\frac{d\left[\ln\left(\sigma(\varepsilon)\right)\right]}{d\varepsilon}\right\}_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \qquad (4)$$

где k_B – постоянная Больцмана, ε_F – энергия Ферми, $\sigma(\varepsilon)$ – величина дифференциального вклада носителей заряда с энергией ε в электропроводность.

Следует учитывать, что формула (4), вообще говоря, относится к металлам и вырожденным полупроводникам и может быть не вполне корректной для sp^2-углерода. Однако она полезна для понимания общих тенденций: в окрестности дискретного энергетического уровня все производные по энергии велики, что, при оптимальном положении уровня Ферми, может обеспечить большую величину коэффициента Зеебека [3]. Варьирование параметров, а именно – размера частицы, электрического потенциала и т. п. – позволяет осуществлять «настройку» относительного положения уровня Ферми и разрешенных энергетических уровней, оптимизируя его для достижения высокой термоэлектрической эффективности.

Сопоставление термоэлектрических свойств углеродных и металлических наночастиц может позволить отделить влияние размерных эффектов от влияния электронной структуры конкретных материалов. На рис. 2,*d* представлены АСМ-изображение и профиль поверхности наночастиц вольфрама для образца, сформированного на кремниевой подложке и приготовленного для исследования; подложка идентична таковым, используемым в остальных случаях.

Численное моделирование

В ходе общего планирования эксперимента было проведено численное моделирование распределения температуры по области контакта АСМ-зонда с плоской подложкой. Использовался программный пакет COMSOL Multiphysics, реализующий метод конечных элементов. При заданных геометрии и наборе граничных/начальных условий, пакет в принципе позволяет проводить поиск численных решений систем дифференциальных уравнений практически любого вида, в том числе систем, учитывающих размерные эффекты и нелокальность; например, уравнений из теоретических работ [32 – 37]. Однако на данном этапе исследований моделировалось лишь распределение температуры (но не термоэлектрического потенциала), причем использовались стандартные уравнения макроскопической теории теплопереноса и табличные значения тепловых параметров материалов. Такой подход определяется тем, что задачи моделирования на данном этапе (планирования эксперимента) были ограниченными.

Представим основные требования к этим задачам.

Во-первых, следовало установить, необходимы ли локальные измерения температуры вблизи области наноконтакта или достаточно определить температуры подложки образца и массивной части держателя зонда АСМ. Для этого фактически было необходимо оценить, какая часть общего перепада температуры между этими деталями (температуру которых измерить несложно) приходится на кантилевер стандартного зонда в типичных условиях эксперимента.

Во-вторых, требовалось определить, необходимы ли измерения в условиях вакуума или допустим эксперимент в атмосферных условиях. Для этого следовало оценить степень влияния воздушной среды и равновесного слоя адсорбата на свободных поверхностях на распределение температуры в области наноконтакта.

В-третьих, было необходимо определить, возможно ли использование стандартного металлизированного зонда в качестве металлического электрода наноконтакта металл/sp^2-углерод или металл/полупроводник.

В-четвертых, требовалось оценить время установления температурного распределения после формирования наноконтакта в условиях планируемых экспериментов.

Для решения этих задач была необходима оценка перепадов температуры прежде всего на вспомогательных элементах экспериментального прибора (в первую очередь, на кантилевере АСМ-зонда), характерные размеры которых достаточно велики, чтобы вычисления по стандартной теории обеспечивали достаточную точность. Существенных погрешностей расчетов при этом можно было ожидать для самой области наноконтакта (вероятнее всего, в сторону меньшей теплопроводимости), что учитывалось при анализе результатов. При выборе экспериментальной конфигурации требовалось, чтобы бóльшая часть создаваемого перепада температуры концентрировалась в области наноконтакта. В этом случае максимальную оценку ожидаемой величины термоэдс можно получить простым умножением перепада температуры ΔT на даваемое теорией эффективное значение термоэлектрического коэффициента S (по данным статьи [21], для рассмотренной там структуры оно может достигать 50 мВ/К).

Расчеты распределения температуры проводили путем решения стандартного уравнения теплопроводности вида

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \nabla T + \nabla \mathbf{q} = Q, \tag{5}$$

где ρ, C_p – массовая плотность и теплоемкость вещества; **u** – его локальная скорость (полагалась тождественно равной нулю); **q** – плотность потока тепла; Q – плотность источников тепла.

На данном этапе исследований постулировалась линейная связь величины **q** с градиентом температуры (закон Фурье):

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \tag{6}$$

где κ – коэффициент теплопроводности.

Использовались значения параметров материалов, приведенные в табл. 1. Был задействован модуль “Heat Transfer in Solids and Fluids” пакета COMSOL Multiphysics, а при расчете переноса тепла через воздушную среду – также и модуль “Laminar Flow”.

Таблица 1

Тепловые параметры материалов, использованные при моделировании

Параметр	Значение параметра для материала			
	Si	Cu	Pt	Адсорбат (вода)
Теплоемкость, Дж/(кг·К)	700	375	133	4200
Плотность, кг/м^3	2329	8960	21450	1000
Теплопроводность, Вт/(м·К)	130	394	71,6	0,56

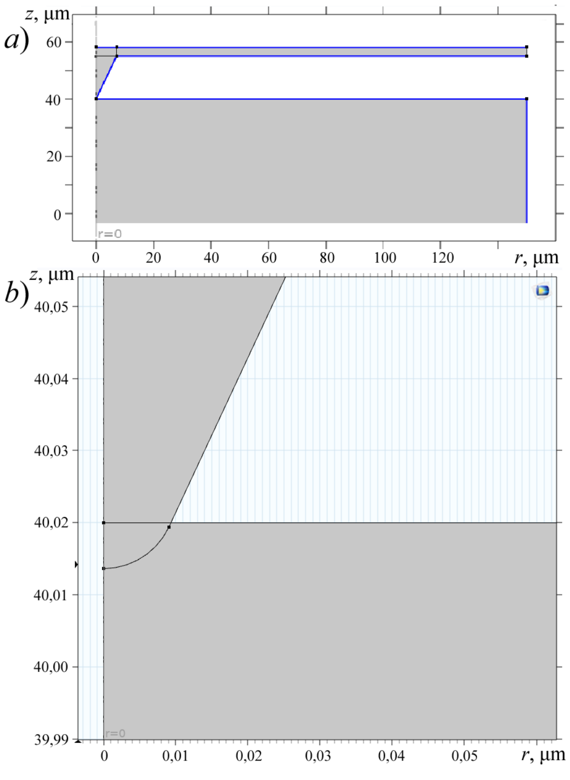


Рис. 3. Геометрия задачи численного моделирования распределения температуры по области наноконтакта АСМ-зонда с плоской подложкой: *а* – общий вид, *b* – область наноконтакта

Моделировался контакт кремниевого зонда АСМ с медной подложкой (толстая пластина). Геометрия острия и кантилевера (рис. 3,*a*, табл. 2) была задана в соответствии с параметрами и изображением зонда NSG10, приведенными на сайте производителя (НТ-МДТ, Россия). Для упрощения расчетов решалась 2D-задача с осью симметрии, проходящей через центр площадки контакта зонда с плоской подложкой. Форма острия зонда задавалась как конус, сопряженный со сферой (рис. 3,*b*). Радиус сферы брался равным 10 нм. Эта же сферическая поверхность считалась границей острия с подложкой; предполагалось, что механическое прижимное действие зонда было достаточно сильным для пластической деформации меди в области контакта. Отклонение 2D-геометрии от истинной 3D-геометрии компенсировалось через задание параметров материала кантилевера: его теплопроводность и теплоемкость в левой части (см. рис. 3,*a*) задавались табличными данными, а далее уменьшались по радиальной координате по закону $1/r$.

В начальный момент времени температура подложки задавалась равной 0°C, температура всех частей зонда – равной 100°C (при использовании линейных уравнений конкретные значения этих параметров не влияют на вид распределения). Граничные условия Дирихле ставились для нижней границы подложки (0°C) и для правого торца кантилевера (100°C). При решении задачи теплопроводности вычислялись стационарное распределение температуры, а также динамика установления этого стационарного состояния.

Таблица 2

Геометрические параметры зонда АСМ, использованные при моделировании

Размер балки, мкм			Размер острия, нм		Угол при вершине конуса, град
Длина	Ширина	Толщина	Высота	Радиус кривизны	
125	27	3	$1{,}5\cdot10^4$	10	50

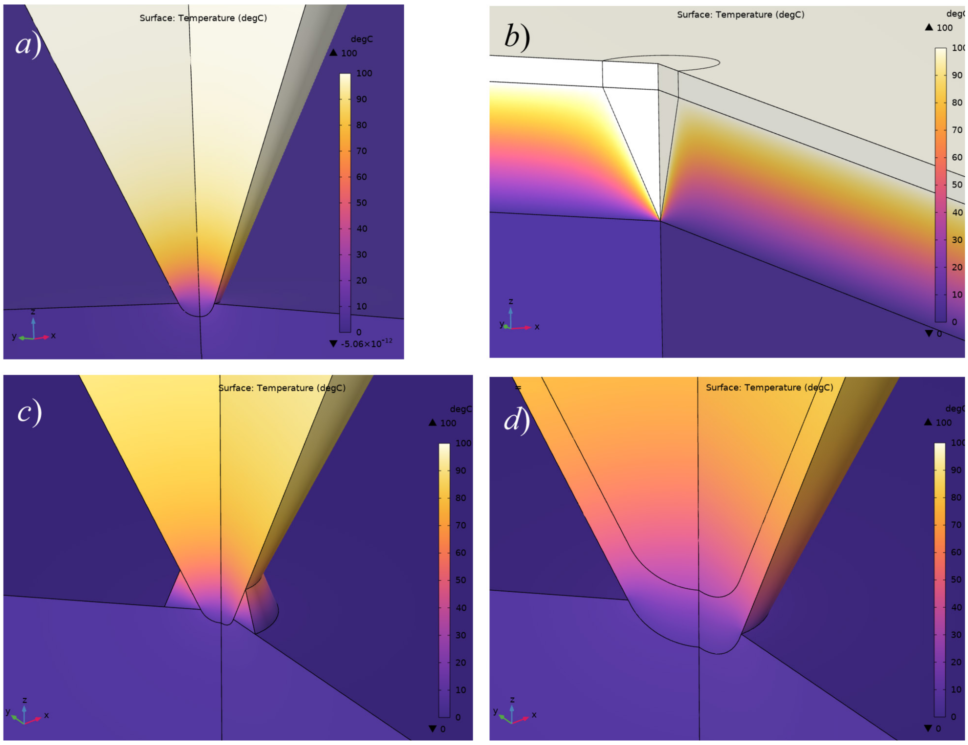


Рис. 4. Результаты решения задачи теплопроводности в области наноконтакта кремниевого зонда АСМ с медной подложкой.
Представлены распределения температуры в условиях вакуума (*a*), с учетом теплопроводности через воздух (*b*) и присутствия на поверхности слоя жидкости (*c*), а также при наличии слоя металлизации зонда платиной (*d*)

На рис. 4 представлены результаты проведенного моделирования. Температурное распределение (см. рис. 4,*a*) было получено для кремниевого зонда, находящегося в контакте с чистой поверхностью медной пластины в условиях вакуума; перенос тепла электромагнитным излучением считался несущественным [41]. Как и ожидалось, в этих условиях доминирующая часть перепада температуры приходится на зонд, материал которого характеризуется меньшей теплопроводностью; геометрический фактор (коническая форма) также несколько увеличивает его тепловое сопротивление. Температура существенным образом изменяется лишь в области зонда вблизи наноконтакта, до расстояний порядка нескольких величин его радиуса. Перепад температуры на кантилевере пренебрежимо мал: заведомо не превосходит 1 % от полной разности температур.

Результаты моделирования стационарного распределения температуры в присутствии воздуха представлены на рис. 4,*b*. Были учтены потоки тепла через воздух за счет теплопроводности и конвекции. Здесь можно видеть непрерывное и приблизительно линейное изменение температуры в промежутке между пластиной и кантилевером. Из литературы известно [41, 51], что полный поток тепла между АСМ-зондом и подложкой при атмосферном давлении в большой степени определяется именно конвекцией. Однако расчет показал, что теплопроводность кантилевера достаточна для того, чтобы конвективный поток тепла не искажал заметным образом температурное распределение вблизи наноконтакта и не изменял температуру основания (широкой части) зонда более чем на доли процента от ее полного перепада.

Сказанное выше относится и к влиянию слоя воды и адсорбированных газов, покрывающих свободные поверхности при нормальных условиях [41, 42]. Для оценки степени влияния адсорбата на распределение температуры, в модель был введен кольцевой слой (толщина 20 нм) с теплопроводностью воды, в область наноконтакта (см. рис. 4,*c*). Из сравнения результата расчета, представленного на рис. 4,*c*, с данными рис. 4,*a* видно, что влияние жидкого слоя на распределение температуры в наноконтакте минимально.

И наконец, была проведена оценка влияния металлизации зонда. Результат расчета температурного распределения для зонда, покрытого слоем платины толщиной 30 нм, показан на рис. 4,*d*. Видно, что значительная часть перепада температуры приходится именно на слой платины, имеющей относительно низкую теплопроводность. Следовательно, использование зондов с платиновым покрытием в планируемых экспериментах нежелательно. Предпочтительнее использовать зонды с другим покрытием, например из золота (его теплопроводность – 317 Вт/(м·K)) или другого металла с высокой теплопроводностью (например, из меди или серебра).

Таблица 3

Результаты моделирования времени установления стационарного распределения температуры при варьировании условий

Условие	Время установления, мкс	
	Зонд без покрытия	Зонд с покрытием из платины
Базовая модель (вакуум)	3,0	4,0
Атмосферный воздух	1,3	4,0
Слой жидкости на поверхности	$4{,}0 \cdot 10^3$	$4{,}0 \cdot 10^3$
Воздух + жидкость	$4{,}0 \cdot 10^3$	–

Результаты моделирования динамики установления температурного распределения после приведения зонда в контакт с поверхностью показали, что в отсутствие воздуха характерное время такого процесса не превышает нескольких микросекунд (табл. 3). В экспериментах в режиме регистрации кривых подвода (force-distance) АСМ такая задержка может быть проигнорирована. При моделировании теплопереноса через воздух время установления распределения температуры в воздушной среде оказалось существенно большим – миллисекунды. Однако и это, по всей видимости, не должно препятствовать измерениям, поскольку сам поток тепла через воздух должен слабо влиять на температуру зонда и подложки, а для приконтактной области время стабилизации температуры по-прежнему измеряется микросекундами. Этот вывод согласуется с литературными данными [45].

Таким образом, проведенное численное моделирование в упрощенной COMSOL-модели позволило решить его основную задачу: получить положительный ответ на вопрос о возможности постановки экспериментов по выявлению особенностей термоэлектрического эффекта в атмосферных условиях с использованием АСМ NanoDST и стандартных зондов.

Заключение

В работе представлены результаты начального этапа исследования, проводимого в Высшей инженерно-физической школе СПбПУ Петра Великого и посвященного изучению наноразмерных особенностей термоэлектрического эффекта. Конечной его целью является создание термоэлектрических генераторов с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

В качестве первоочередной задачи выбрана экспериментальная проверка известной из литературы теории, описывающей возможность достижения высоких значений термоэлектрической эффективности за счет использования феномена увлечения носителей электрического заряда баллистическим потоком фононов в пленочной наноструктуре. Мы считаем, что проверка данной концепции может быть проведена относительно простыми средствами, а именно – измерением термоэлектрических характеристик наноуглеродных наноостровков и листков графена, сформированных на кремниевой подложке.

Результаты численного моделирования показали, что такие измерения можно провести с использованием атмосферного атомно-силового микроскопа со стандартными зондами после его дооборудования системами регулирования и измерения температуры образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sadeghi H.** Quantum and phonon interference-enhanced molecular-scale thermoelectricity // The Journal of Physical Chemistry C. 2019. Vol. 123. No. 20. Pp. 12556–12562.

2. **Karlström O., Linke H., Karlström G., Wacker A.** Increasing thermoelectric performance using coherent transport // Physical Review B. 2011. Vol. 84. No. 11. P. 113415.

3. **Mahan G. D., Sofo J. O.** The best thermoelectric // Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA. 1996. Vol. 93. No. 15. Pp. 7436–7439.

4. **Дмитриев А. С.** Введение в нанотеплофизику. 2-е изд., электронное. М.: Лаборатория знаний, 2020. 793 с.

5. **Zevalkink A., Smiadak D. M., Blackburn J. L., et al.** A practical field guide to thermoelectrics: Fundamentals, synthesis, and characterization // Applied Physics Reviews. 2018. Vol. 5. No. 2. P. 021303.

6. **Lyeo H. K., Khajetoorians A. A., Shi L., Pipe K. P., Ram R. J., Shakouri A., Shih C. K.** Profiling the thermoelectric power of semiconductor junctions with nanometer resolution // Science. 2004. Vol. 303. No. 5659. Pp. 816–818.

7. **Ikeda H., Salleh F.** Influence of heavy doping on Seebeck coefficient in silicon-on-insulator // Applied Physics Letters. 2010. Vol. 96. No. 1. P. 012106.

8. **Salleh F., Suzuki Y., Miwa K., Ikeda H.** Modulation of Seebeck coefficient for silicon-on-insulator layer induced by bias-injected carriers // Applied Physics Letters. 2013. Vol. 103. No. 6. P. 062107.

9. **Tretiakov O. A., Abanov Ar., Sinova J.** Holey topological thermoelectrics // Applied Physics Letters. 2011. Vol. 99. No. 11. P. 113110.

10. **Krali E., Durrani Z. A. K.** Seebeck coefficient in silicon nanowire arrays // Applied Physics Letters. 2013. Vol. 102. No. 14. P. 143102.

11. **Taniguchi T., Terada T., Komatsubara Y., Ishibe T., Konoike K., Sanada A., Naruse N., Mera Y., Nakamura Y.** Phonon transport in the nano-system of Si and SiGe films with Ge nanodots and approach to ultralow thermal conductivity // Nanoscale. 2021. Vol. 13. No. 9. Pp. 4971–4977.

12. **Bergfield J. P., Solis M. A., Stafford C. A.** Giant thermoelectric effect from transmission supernodes // ACS (American Chemical Society) Nano. 2010. Vol. 4. No. 9. Pp. 5314–5320.

13. **Хвесюк В. И., Скрябин А. С.** Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55. № 3. С. 447–471.

14. **Dubi Y., Di Ventra M.** Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions // Reviews of Modern Physics. 2011. Vol. 83. No. 1. Pp. 131–155.

15. **Sadeghi H., Sangtarash S., Lambert C. J.** Oligoyne molecular junctions for efficient room temperature thermoelectric power generation // Nano Letters. 2015. Vol. 15. No. 11. Pp. 7467–7472.

16. **Cui L., Miao R., Wang K., Thompson D., Zotti L. A., Cuevas J. C., Meyhofer E., Reddy P.** Peltier cooling in molecular junctions // Nature Nanotechnology. 2018. Vol. 13. No. 2. Pp. 122–127.

17. **Liu C., Lu P., Chen W., Zhao Y., Chen Y.** Phonon transport in graphene based materials // Physical Chemistry, Chemical Physics. 2021. Vol. 23. No. 46. Pp. 26030–26060.

18. **Варламов А. А., Кавокин А. В., Лукьянчук И. А., Шарапов С. Г.** Аномальные термоэлектрические и термомагнитные свойства графена // Успехи физических наук. 2012. Т. 182. № 11. С. 1229–1234.

19. **Wu Q., Sadeghi H., García-Suárez V. M., Ferrer J., Lambert C. J.** Thermoelectricity in vertical graphene-C_{60}-graphene architectures // Scientific Reports. 2017. Vol. 7. 15 September. P. 11680.

20. **Эйдельман Е. Д.** Термоэлектрический преобразователь с рекордными параметрами на основе углеродных наноструктур: разработка научных основ // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51. № 7. С. 944–947.

21. **Эйдельман Е. Д.** Термоэлектрический эффект и термоэлектрический генератор на основе углеродных наноструктур: достижения и перспективы // Успехи физических наук. 2021. Т. 191. № 6. С. 561–585.

22. **Eydelman E. D., Vul' A. Ya.** The strong thermoelectric effect in nanocarbon generated by ballistic phonon drag of electrons // Journal of Physics: Condensed Matter. 2007. Vol. 19. No. 7. Pp. 266210–266223.

23. **Koniakhin S. V., Eidelman E. D.** Phonon drag thermopower in graphene in equipartition regime // Europhysics Letters. 2013. Vol. 103. No. 3. P. 37006.

24. **Andronov A., Budylina E., Shkitun P., Gabdullin P., Gnuchev N., Kvashenkina O., Arkhipov A.** Characterization of thin carbon films capable of low-field electron emission // Journal of Vacuum Science & Technology B. 2018. Vol. 36. No. 2. P. 02C108.

25. **Gabdullin P., Zhurkin A., Osipov V., Besedina N., Kvashenkina O., Arkhipov A.** Thin carbon films: Correlation between morphology and field-emission capability // Diamond & Related Materials. 2020. Vol. 105. May. P. 107805.

26. **Эйдельман Е. Д., Архипов А. В.** Полевая эмиссия из углеродных наноструктур: модели и эксперимент // Успехи физических наук. 2020. Т. 190. № 7. С. 693–714.

27. **Богачек Э. Н., Кулик И. О., Омельянчук А. Л., Шкорбатов А. Г.** Термоэдс увлечения в металлических системах, содержащих микроконтакт // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1985. Т. 41. № 12. С. 519–521.

28. **Shklyarevskii O. I., Jansen A. G. M., Hermsen J. G. H., Wyder P.** Thermoelectric voltage between identical metals in a point-contact configuration // Physical Review Letters. 1986. Vol. 57. No. 11. Pp. 1374–1377.

29. **Trzcinski R., Gmelin E., Queisser H. J.** Quenched phonon drag in silicon microcontacts // Physical Review Letters. 1986. Vol. 56. No. 10. Pp. 1086–1089.

30. **Weber L., Lehr M., Gmelin E.** Reduction of the thermopower in semiconducting point contacts // Physical Review B. 1992. Vol. 46. No. 15. 9511–9514.

31. **Mahan G. D., Claro F.** Nonlocal theory of thermal conductivity // Physical Review B. 1988. Vol. 38. No. 3. Pp. 1963–1969.

32. **Mahan G. D.** The Benedicks effect: Nonlocal electron transport in metals // Physical Review B. 1991. Vol. 43. No. 5. Pp. 3945–3951.

33. **Grigorenko A. N., Nikitin P. I., Jelski D. A., George T. F.** Thermoelectric phenomena in metals under large temperature gradients // Journal of Applied Physics. 1991. Vol. 69. No. 5. Pp. 3375–3377.

34. **Vermeersch B., Shakouri A.** Nonlocality in microscale heat conduction. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:118469205 (Дата обращения 11.09.2023).

35. **Koh Y. K., Cahill D. G., Sun B.** Nonlocal theory for heat transport at high frequencies // Physical Review B. 2014. Vol. 90. No. 20. P. 205412.

36. **Ezzahri Y., Joulain K., Ordonez-Miranda J.** Heat transport in semiconductor crystals: Beyond the local-linear approximation // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128. No. 10. P. 105104.

37. **Baratifarimani R., Shomali Z.** Implementation of nonlocal non-Fourier heat transfer for semiconductor nanostructures. https://api.semanticscholar.org/ CorpusID:259317109 (Дата обращения 11.09.2023).

38. **Cahill D. G., Ford W. K., Goodson K. E., Mahan G. D., Majumdar A., Maris H. J., Merlin R., Phillpot S. R.** Nanoscale thermal transport // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 93. No. 2. Pp. 793–818.

39. **Wang C., Chen F., Sun K., Chen R., Li M., Zhou X., Sun Y., Chen D., Wang G.** Instruments for measuring Seebeck coefficient of thin film thermoelectric materials: A mini-review // Review of Scientific Instruments. 2018. Vol. 89. No. 10. P. 101501.

40. **Kim S. J., We J. H., Kim G. S., Cho B. J.** Simultaneous measurement of the Seebeck coefficient and thermal conductivity in the cross-sectional direction of thermoelectric thick film // Journal of Applied Physics. 2012. Vol. 112. No. 10. P. 104511.

41. **Majumdar A.** Scanning thermal microscopy // Annual Review of Materials Science. 1999. Vol. 29. No. 1. Pp. 505–585.

42. **Shi L., Plyasunov S., Bachtold A., McEuen P. L., Majumdar A.** Scanning thermal microscopy of carbon nanotubes using batch-fabricated probes // Applied Physics Letters. 2000. Vol. 77. No. 26. Pp. 4295–4297.

43. **Fletcher P. C., Lee B., King W. P.** Thermoelectric voltage at a nanometer-scale heated tip point contact // Nanotechnology. Vol. 23. No. 3. P. 035401.

44. **Nakamoto G., Nakabayashi Y.** Development of a two dimensional scanning Seebeck coefficient measurement system by a micro-probe method // Intermetallics. 2013. Vol. 32. January. Pp. 233–238.

45. **Tan A., Sadat S., Reddy P.** Measurement of thermopower and current-voltage characteristics of molecular junctions to identify orbital alignment // Applied Physics Letters. 2010. Vol. 96. No. 1. P. 013110.

46. **Cahill D. G., Braun P. V., Chen G., et al.** Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 // Applied Physics Reviews. 2014. Vol. 1. No. 1. P. 011305.

47. **De Boor J., Müller E.** Data analysis for Seebeck coefficient measurements // Review of Scientific Instruments. 2013. Vol. 84. No. 6. P. 065102.

48. **Bizyaev I., Gabdullin P., Chumak M., Babyuk V., Davydov S., Osipov V., Kuznetsov A., Kvashenkina O., Arkhipov A.** Low-field electron emission capability of thin films on flat silicon substrates: Experiments with Mo and general model for refractory metals and carbon // Nanomaterials. 2021. Vol. 11. No. 12. P. 3350.

49. **Arkhipov A. V., Eidelman E. D., Zhurkin A. M., Osipov V. S., Gabdullin P. G.** Low-field electron emission from carbon cluster films: Combined thermoelectric/hot-electron model of the phenomenon // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. Vol. 28. No. 4. Pp. 286–294.

50. **Weber L., Gmelin E.** A new device for transport measurements on point contacts // Review of Scientific Instruments. 1992. Vol. 63. No. 1. Pp. 211–217.

51. **Williams C. C., Wickramasinghe H. K.** Scanning thermal profiler // Applied Physics Letters. 1986. Vol. 49. No. 23. Pp. 1587–1589.

REFERENCES

1. **Sadeghi H.,** Quantum and phonon interference-enhanced molecular-scale thermoelectricity, J. Phys. Chem. C. 123 (20) (2019) 12556–12562.

2. **Karlström O., Linke H., Karlström G., Wacker A.,** Increasing thermoelectric performance using coherent transport, Phys. Rev. B. 84 (11) (2011) 113415.

3. **Mahan G. D., Sofo J. O.,** The best thermoelectric, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 93 (15) (1996) 7436–7439.

4. **Dmitriyev A. S.,** Vvedeniye v nanoteplofiziku, 2-e izdaniye, elektronnoye [Introduction to nanothermophysics, Second electronic edition], "Laboratoriya Znaniy" Publishing, Moscow, 2020 (in Russian).

5. **Zevalkink A., Smiadak D. M., Blackburn J. L., et al.,** A practical field guide to thermoelectrics: Fundamentals, synthesis, and characterization, Appl. Phys. Rev. 5 (2) (2018) 021303.

6. **Lyeo H. K., Khajetoorians A. A., Shi L., et al.,** Profiling the thermoelectric power of semiconductor junctions with nanometer resolution, Science. 303 (5659) (2004) 816–818.

7. **Ikeda H., Salleh F.,** Influence of heavy doping on Seebeck coefficient in silicon-on-insulator, Appl. Phys. Lett. 96 (1) (2010) 012106.

8. **Salleh F., Suzuki Y., Miwa K., Ikeda H.,** Modulation of Seebeck coefficient for silicon-on-insulator layer induced by bias-injected carriers, Appl. Phys. Lett. 103 (6) (2013) 062107.

9. **Tretiakov O. A., Abanov Ar., Sinova J.,** Holey topological thermoelectrics, Appl. Phys. Lett. 99 (11) (2011) 113110.

10. **Krali E., Durrani Z. A. K.,** Seebeck coefficient in silicon nanowire arrays, Appl. Phys. Lett. 102 (14) (2013) 143102.

11. **Taniguchi T., Terada T., Komatsubara Y., et al.,** Phonon transport in the nano-system of Si and SiGe films with Ge nanodots and approach to ultralow thermal conductivity, Nanoscale. 13 (9) (2021) 4971–4977.

12. **Bergfield J. P., Solis M. A., Stafford C. A.,** Giant thermoelectric effect from transmission supernodes, ACS Nano. 4 (9) (2010) 5314–5320.

13. **Khvesyuk V. I., Scriabin A. S.,** Thermal conductivity of nanostructures, High Temperature. 55 (3) (2017) 428–450.

14. **Dubi Y., Di Ventra M.,** Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions, Rev. Mod. Phys. 83 (1) (2011) 131–155.

15. **Sadeghi H., Sangtarash S., Lambert C. J.,** Oligoyne molecular junctions for efficient room temperature thermoelectric power generation, Nano Lett. 15 (11) (2015) 7467–7472.

16. **Cui L., Miao R., Wang K., et al.,** Peltier cooling in molecular junctions, Nat. Nanotechnol. 13 (2) (2018) 122–127.

17. **Liu C., Lu P., Chen W., et al.,** Phonon transport in graphene based materials, Phys. Chem. Chem. Phys. 23 (46) (2021) 26030–26060.

18. **Varlamov A. A., Kavokin A. V., Luk'yanchuk I. A., Sharapov S. G.,** Anomalous thermoelectric and thermomagnetic properties of graphene, Phys.– Usp. 55 (11) (2012) 1146–1151.

19. **Wu Q., Sadeghi H., García-Suárez V. M., et al.,** Thermoelectricity in vertical graphene-C_{60}-graphene architectures, Sci. Rep. 7 (15 Sept) (2017) 11680.

20. **Eidelman E. D.,** On a carbon nanostructure-based thermoelectric converter with record parameters, Semicond. 51 (7) (2017) 906–908.

21. **Eidelman E. D.,** Thermoelectric effect and a thermoelectric generator based on carbon nanostructures: Achievements and prospects, Phys.–Usp. 64 (6) (2021) 535–557.

22. **Eydelman E. D., Vul' A. Ya.,** The strong thermoelectric effect in nanocarbon generated by ballistic phonon drag of electrons, J. Phys. Condens. Matter. 19 (7) (2007) 266210–266223.

23. **Koniakhin S. V., Eidelman E. D.,** Phonon drag thermopower in graphene in equipartition regime, Europhys. Lett. 103 (3) (2013) 37006.

24. **Andronov A., Budylina E., Shkitun P., et al.,** Characterization of thin carbon films capable of low-field electron emission, J. Vac. Sci. Technol. B. 36 (2) (2018) 02C108.

25. **Gabdullin P., Zhurkin A., Osipov V., et al.,** Thin carbon films: Correlation between morphology and field-emission capability, Diam. Relat. Mater. 105 (May) (2020) 107805.

26. **Eidelman E. D., Arkhipov A. V.,** Field emission from carbon nanostructures: Models and experiment, Phys.–Usp. 63 (7) (2020) 648–667.

27. **Bogachek E. N., Kulik I. O., Omel'yanchuk A. N., Shkorbatov A. G.,** Drag-related thermo-emf in metallic systems containing a point contact, JETP Lett. 41 (12) (1985) 633–636.

28. **Shklyarevskii O. I., Jansen A. G. M., Hermsen J. G. H., Wyder P.,** Thermoelectric voltage between identical metals in a point-contact configuration, Phys. Rev. Lett. 57 (11) (1986) 1374–1377.

29. **Trzcinski R., Gmelin E., Queisser H. J.,** Quenched phonon drag in silicon microcontacts, Phys. Rev. Lett. 56 (10) (1986) 1086–1089.

30. **Weber L., Lehr M., Gmelin E.,** Reduction of the thermopower in semiconducting point contacts, Phys. Rev. B. 46 (15) (1992) 9511–9514.

31. **Mahan G. D., Claro F.,** Nonlocal theory of thermal conductivity, Phys. Rev. B. 38 (3) (1988) 1963–1969.

32. **Mahan G. D.,** The Benedicks effect: Nonlocal electron transport in metals, Phys. Rev. B. 43 (5) (1991) 3945–3951.

33. **Grigorenko A. N., Nikitin P. I., Jelski D. A., George T. F.,** Thermoelectric phenomena in metals under large temperature gradients, J. Appl. Phys. 69 (5) (1991) 3375–3377.

34. **Vermeersch B., Shakouri A.,** Nonlocality in microscale heat conduction, https://api.semanticscholar.org/CorpusID:118469205. (Accessed September 11, 2023).

35. **Koh Y. K., Cahill D. G., Sun B.,** Nonlocal theory for heat transport at high frequencies, Phys. Rev. B. 90 (20) (2014) 205412.

36. **Ezzahri Y., Joulain K., Ordonez-Miranda J.,** Heat transport in semiconductor crystals: Beyond the local-linear approximation, J. Appl. Phys. 128 (10) (2020) 105104.

37. **Baratifarimani R., Shomali Z.,** Implementation of nonlocal non-Fourier heat transfer for semiconductor nanostructures, https://api.semanticscholar.org/CorpusID:259317109 (Accessed September 11, 2023).

38. **Cahill D. G., Ford W. K., Goodson K. E., et al.,** Nanoscale thermal transport, J. Appl. Phys. 93 (2) (2003) 793–818.

39. **Wang C., Chen F., Sun K., et al.,** Instruments for measuring Seebeck coefficient of thin film thermoelectric materials: A mini-review, Rev. Sci. Instrum. 89 (10) (2018) 101501.

40. **Kim S. J., We J. H., Kim G. S., Cho B. J.,** Simultaneous measurement of the Seebeck coefficient and thermal conductivity in the cross-sectional direction of thermoelectric thick film, J. Appl. Phys. 112 (10) (2012) 104511.

41. **Majumdar A.,** Scanning thermal microscopy, Annu. Rev. Mater. Sci. 29 (1) (1999) 505–585.

42. **Shi L., Plyasunov S., Bachtold A., et al.,** Scanning thermal microscopy of carbon nanotubes using batch-fabricated probes, Appl. Phys. Lett. 77 (26) (2000) 4295–4297.

43. **Fletcher P. C., Lee B., King W. P.,** Thermoelectric voltage at a nanometer-scale heated tip point contact, Nanotechnology. 23 (3) (2011) 035401.

44. **Nakamoto G., Nakabayashi Y.,** Development of a two dimensional scanning Seebeck coefficient measurement system by a micro-probe method, Intermetallics. 32 (Jan) (2013) 233–238.

45. **Tan A., Sadat S., Reddy P.,** Measurement of thermopower and current-voltage characteristics of molecular junctions to identify orbital alignment, Appl. Phys. Lett. 96 (1) (2010) 013110.

46. **Cahill D. G., Braun P. V., Chen G., et al.,** Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012, Appl. Phys. Rev. 1 (1) (2014) 011305.

47. **De Boor J., Müller E.,** Data analysis for Seebeck coefficient measurements, Rev. Sci. Instrum. 84 (6) (2013) 065102.

48. **Bizyaev I., Gabdullin P., Chumak M., et al.,** Low-field electron emission capability of thin films on flat silicon substrates: Experiments with Mo and general model for refractory metals and carbon, Nanomaterials. 11 (12) (2021) 3350.

49. **Arkhipov A. V., Eidelman E. D., Zhurkin A. M., et al.,** Low-field electron emission from carbon cluster films: Combined thermoelectric/hot-electron model of the phenomenon, Fuller. Nanotub. Car. N. 28 (4) (2020) 286–294.

50. **Weber L., Gmelin E.,** A new device for transport measurements on point contacts, Rev. Sci. Instrum. 63 (1) (1992) 211–217.

51. **Williams C. C., Wickramasinghe H. K.,** Scanning thermal profiler, Appl. Phys. Lett. 49 (23) (1986) 1587–1589.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТРОФИМОВИЧ Карина Робертовна – *студентка Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
karina-khasanova-2001@mail.ru

ГАБДУЛЛИН Павел Гарифович – *кандидат технических наук, доцент, директор Научно-технологического центра «Нейропрогнозирование материалов и технологий электронной промышленности» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
gabdullin_pg@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2519-2577

АРХИПОВ Александр Викторович – *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
arkhipov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3321-7797

THE AUTHORS

TROFIMOVICH Karina R.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
karina-khasanova-2001@mail.ru

GABDULLIN Pavel G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
gabdullin_pg@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2519-2577

ARKHIPOV Alexander V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
arkhipov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3321-7797

Статья поступила в редакцию 16.09.2023. Одобрена после рецензирования 01.12.2023. Принята 01.12.2023.

Received 16.09.2023. Approved after reviewing 01.12.2023. Accepted 01.12.2023.

Physical electronics

Original article
UDC 621.385.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16410

ENHANCEMENT OF THE 4-mm WAVELENGTH GYROTRON EFFICIENCY BY MULTISTAGE ENERGY RECOVERY

O. I. Louksha ✉, **P. A. Trofimov, A. G. Malkin**

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

✉ louksha@rphf.spbstu.ru

Abstract. This study presents the results of a complex physical modeling of a moderate power gyrotron operating at the 4-mm wavelength range. The characteristics of electrodes and magnetic coils in a four-stage recovery collector were optimized taking into account the coordinate and velocity distributions of electrons. These distributions were obtained through a trajectory analysis in the electron optical system and calculation of electron-wave interaction in the gyrotron cavity. To reduce parasitic effects of the bundles of a toroidal solenoid used to create an azimuthal magnetic field in the collector region, a sectioned electron beam was employed. The study demonstrated that the gyrotron's total efficiency of approximately 79 % could be achieved, being close to the maximum efficiency value achievable with separation of electron fractions with different energies, provided that the current of electrons reflected from a collector should not exceed 1% of the total current of an electron beam.

Keywords: microwave electronics, gyrotron, helical electron beam, recuperation, residual electron energy recovery

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-29-00136).

For citation: Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G., Enhancement of the 4-mm wavelength gyrotron efficiency by multistage energy recovery, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 118–133. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16410

Научная статья
УДК 621.385.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16410

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГИРОТРОНА С ДЛИНОЙ ВОЛНЫ 4 мм ЗА СЧЕТ МНОГОСТУПЕНЧАТОЙ РЕКУПЕРАЦИИ

О. И. Лукша ✉, **П. А. Трофимов, А. Г. Малкин**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ louksha@rphf.spbstu.ru

Аннотация. В работе представлены результаты комплексного физического моделирования гиротрона средней мощности, работающего на длине волны 4 мм. Проведена оптимизация характеристик электродов и магнитных катушек в коллекторе с четырехступенчатой рекуперацией с учетом распределения электронов по координатам и скоростям. Эти распределения были получены путем траекторного анализа в электронно-оптической системе и расчета электронно-волнового взаимодействия в резонаторе гиротрона. Для снижения паразитного воздействия связок тороидального соленоида, используемого для создания азимутального магнитного поля в области коллектора, использован секционированный электронный пучок. Исследование показало, что можно получить общий КПД гиротрона около 79 %, что близко к максимальному значению, достижимому при идеальном разделении электронных фракций с разными энергиями, при условии, что ток отраженных от коллектора электронов не должен превышать 1 % от общего тока электронного пучка.

Ключевые слова: СВЧ-электроника, гиротрон, винтовой электронный поток, рекуперация, возвращение остаточной энергии электронов

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-29-00136).

Для цитирования: Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г. Повышение эффективности гиротрона с длиной волны 4 мм за счет многоступенчатой рекуперации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 118–133. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16410

Introduction

In recent years, there has been an intensive search for new ways to improve powerful gyrotron-type devices due to the wide possibilities of their practical use. Gyrotrons occupy a leading position among effective sources of powerful microwave radiation in the millimeter and submillimeter wavelength ranges. They are irreplaceable in such an important application as electron-cyclotron plasma heating and current drive (ECH&CD) in magnetic confinement fusion systems designed to produce energy through controlled thermonuclear fusion (see, for example, Refs. [1 – 3]). The requirements to gyrotrons designed for thermonuclear fusion are exceptionally high. The ITER project requires gyrotrons operating at a frequency of 170 GHz, delivering an output power of approximately 1 MW and achieving a total efficiency exceeding 50 % [4]. The development of a new generation of nuclear fusion reactors will require resolving numerous physical and engineering tasks to improve gyrotrons performance. The DEMO project envisions usage of gyrotrons with a frequency exceeding 200 GHz and a total efficiency greater than 60 % at megawatt-level power [5]. Enhancement of device's energy efficiency simplifies dissipation of spent beam energy at collector, which is critical for reliable and long-time operation of high-power gyrotrons operating in the continuous wave (CW) regime. Achieving such high efficiencies is one of the primary objectives for developers of powerful gyrotrons today.

Increasing the gyrotrons' efficiency, as well as other vacuum sources of microwave radiation, can be achieved by recovering residual energy of spent electron beam in the collector. Almost all megawatt-level gyrotrons used in thermonuclear fusion systems are equipped by collectors with single-stage recovery which increase their total efficiency to 50 – 55% [6 – 8]. A further increase in efficiency is possible with multistage energy recovery systems. Such systems require spatial separation of electron beam fractions with different energies and deposition of these fractions on collector sections with different depressing potentials. However, to the best of our knowledge, no experiments have been conducted on gyrotrons with multistage recovery collector systems. The implementation of such systems has proven challenging due to specifics of velocity and coordinate distributions of electrons in helical electron beams (HEBs) of gyrotrons and due to the presence of residual magnetic field in collector region. A promising solution for spatial separation of electrons in gyrotron HEBs is the use of crossed electric and magnetic fields [9 – 11].

At Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University (SPbPU), a possibility of electron separation in longitudinal electric and azimuthal magnetic fields has been proposed and investigated theoretically for development of gyrotrons with multistage recovery collectors [12].

The achievement of high gyrotrons' efficiency implies the high efficiency of transformation of electron energy to electromagnetic field energy in the cavity. The efficiency of this transformation is determined by quality of the HEB formed in the electron optical system. The research aimed at improving the HEB quality was carried out at SPbPU using an experimental gyrotron with a frequency of 74.2 GHz and an output power of approximately 100 kW [13 – 15]. This gyrotron was equipped with unique diagnostic complex capable of measuring the HEB parameters and regulating distributions of electric and magnetic fields in electron optical system. The initial version of a four-stage recovery collector for this gyrotron was described in Ref. [16]. In this work, the collector system geometry was significantly modified and distributions of electric and magnetic fields were optimized, resulting in a noticeable enhancement of residual energy recovery efficiency. The multistage recovery system described in this paper has already been implemented in the SPbPU gyrotron.

This article is organized as follows.

Section I presents the results of trajectory analysis of the HEB in the electron optical system of the gyrotron. The approach that considers initial spread of electron velocities caused by roughness of cathode surface and by thermal velocity spread was implemented [17]. Regulation of electric field distribution in the cathode region allowed to increase the HEB's quality and maximum average pitch factor.

Section II describes the results of the Particle-in-Cell (PIC) simulation in the cavity region of the gyrotron using the input HEB parameters determined from the trajectory analysis in the electron optical system. The output radiation parameters at $TE_{12,3}$ operating mode and the characteristics of spent electron beam entering the collector region were obtained in this simulation.

Section III presents the results of trajectory analysis in the four-stage recovery collector, where parameters of electrodes and magnetic coils were optimized to achieve the maximum recovery efficiency and to minimize the current of electrons reflected from the collector. All calculations were performed using the CST Studio Suite software. Specifics of conducting calculations in CST Studio Suite, such as model construction, meshing, choice of computational parameters, etc., employed in this study, were similar to those described earlier in Refs. [16, 18].

I. Electron optical system

Table 1 shows the parameters of the SPbPU gyrotron operating regime. Fig. 1 shows a schematic drawing of the electron optical system elements in the r–z plane, including calculated electron trajectories. An electron beam in the gyrotron is formed using a three-electrode magnetron-injection gun (MIG). Thus, it is possible to modify parameters of the HEB by varying the voltage U_a between the anode and device's body. The accelerating voltage U_0 between the cathode and body which determines an average electron energy in the HEB remained constant at 30 kV during the calculations described below. The cathode assembly includes a control electrode positioned behind the cathode emissive strip, which can be used to optimize distribution of electric field in the cathode region and to minimize the velocity spread of electrons by adjusting the voltage at control electrode U_{cont} [19]. At the values of U_0, B_0, B_c and I_b indicated in Table 1 and in the case of $U_a = 0$ and $U_{cont} = 0$, the average pitch factor of electrons α was approximately 1.3. All HEB parameters mentioned in this section were determined in the central plane of the cavity $z = 260.5$ mm (see Fig. 1). The objective of trajectory analysis in the electron optical system was to achieve a high pitch factor ($\alpha > 1.5$) with a low velocity spread and minimal electron reflection from the magnetic mirror by regulating the voltages U_a and U_{cont}. Additionally, the magnetic compression coefficient B_0/B_c was varied by adjusting the magnetic field induction near cathode B_c to ensure optimal beam radius in the cavity (see Section II).

The present calculations differ from the previous ones described in Ref. [16] by taking into account initial electron velocity spread caused by roughness of cathode surface and thermal velocity spread. As shown in Ref. [17], the velocity characteristics of electrons in the beam can be made approximately coincided for two cathode models: (a) a rough cathode with inhomogeneities on its surface in the form of micron-sized hemispheres with radius r_0 and (b) a smooth cathode with Maxwell distribution of the initial velocities at an increased effective cathode temperature T^* and a spread of the angle φ between the direction of the initial velocity vector and direction of the normal. The angle φ is uniformly distributed in the range from $-\Delta\varphi$ to $+\Delta\varphi$. For instance, an initial transverse velocity spread is the same for the model (a) at $r_0 = 14$ μm and for the model (b) at $T^* = 67\ 000$ K and $\Delta\varphi = \pm 90°$. Therefore, at the appropriate values of T^* and $\Delta\varphi$ the velocity spread factor associated with roughness of the cathode surface can be taken into account when performing a three-dimensional trajectory analysis in the electron optical gyrotron system with a smooth cathode. It should be noted that at the T^* value being much higher than the actual cathode temperature T_c, the average electron energy in the HEB $\langle W \rangle$ and the energy spread δW additionally increase. An increase in the average energy can be compensated by changing of the accelerating voltage. The additional energy spread δW is much less than the energy spread caused by the beam potential depression [16]. Since $T^* >> T_c$, an initial velocity spread set within the framework of this model can be considered as being caused by the combined effect of roughness of cathode surface and the thermal velocity spread. Further simulations were carried out at $T^* = 67\ 000$ K and $\Delta\varphi = \pm 90°$. At such T^* and $\Delta\varphi$ values, the value of the transverse velocity spread $\delta v_\perp$ obtained in the calculations was found to approximately coincide with the corresponding value of velocity spread determined in experiments with hexaboride lanthanum cathode in the SPbPU gyrotron [17].

An important aspect of the simulation discussed in this study is implementation of a sectioned cathode. Two azimuthal sectors without electron emission were symmetrically located on the emissive strip. This cathode sectioning allowed for a significant reduction of parasitic effects near toroidal solenoid bundles used to create an azimuthal magnetic field in the collector region, which affect efficiency of residual electron energy recovery and electron reflection from the collector (see Section III). In the previous simulations [16], the length of each cathode gap sector in azimuthal direction was $\Delta\theta = 70°$. In this study, $\Delta\theta$ was decreased to 45° as a result of optimization of 4-stage collector geometry and operating regimes compared to the original version described in Ref. [16]. Calculations in the electron optical system were performed using Particle Tracking Solver, with number of emission points at the cathode set to 2700. To minimize parasitic effect of mesh step on parameters of high-energy beam, particularly on electron energy spread, a tetrahedral meshing of calculation domain was used.

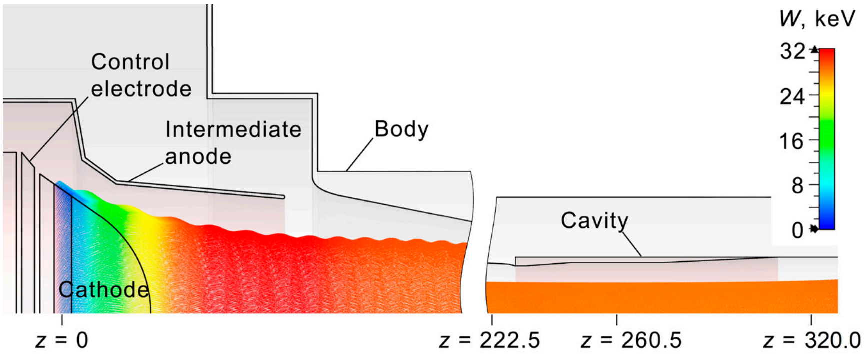


Fig. 1. Schematic drawing of the gyrotron model in the $r-z$ plane with beam trajectories

Table 1

The main geometric parameters of the gyrotron and the characteristics of its operating regime

Parameter, notation, unit	Value
Accelerating voltage U_0, kV	30
Beam current I_b, A	10
Magnetic field induction in the cavity center B_0, T	2.75
Magnetic field induction at the cathode B_c, T	0.152
Operating mode	$TE_{12,3}$
Operating frequency f_0, GHz	74.2
Cavity radius R_0, mm	14.45
Average radius of the cathode emissive strip R_c, mm	35.00

In the experimental gyrotron, magnetic compression coefficient B_0/B_c varies as a result of change in a number of turns of cathode coil [13]. The highest microwave output power in simulations was achieved at $B_0/B_c = 17.01$, which corresponds to 26 turns of cathode coil. In this case, an average beam radius in the cavity was approximately 8.5 mm. In the optimized regime with $T^* = 67\,000$ K, $\Delta\varphi = \pm 90°$, $\Delta\theta = 45°$, $B_0/B_c = 17.01$, $U_a = 7.85$ kV and $U_{cont} = -14.5$ kV, an average pitch factor value α of 1.56 and a transverse velocity spread $\delta v_\perp$ of 5.32 % were provided. The values of velocity and energy spreads were defined as relative standard deviations from the average value of corresponding quantities. The accelerating voltage U_0, the magnetic field induction in the cavity center B_0 and the beam current I_b had values listed in Table I. In this regime, one of 2700 electron trajectories was reflected from the magnetic mirror, resulting in a reflection coefficient K_{ref} of approximately $4{\cdot}10^{-4}$.

Note that, if we assume a Gaussian distribution of the electron velocities, for $\alpha = 1.56$ and $\delta v_\perp = 5.32\%$, the reflection coefficient from the magnetic mirror is $K_{ref} = 2.1{\cdot}10^{-4}$ [13]. It should be noted that reflection of electrons from the magnetic mirror limits an increase in the average pitch factor in the presence of the electron velocity spread. If the coefficient K_{ref} exceeds threshold value, the parasitic low-frequency oscillations (LFOs) can occur in the electron space charge trapped between the cathode and cavity. These oscillations lead to a degradation of the HEB quality [14, 20 – 22]. Based on the experimental data of the SPbPU gyrotron, the threshold value of the reflection coefficient from the magnetic mirror was determined as approximately equal to $1.7{\cdot}10^{-3}$. In the gyrotron operating regime described above, the reflection coefficient was lower than this threshold value. Values of an average pitch factor α and the transverse velocity spread $\delta v_\perp$ in the case of homogeneous emission from the cathode in the described operating regime were 1.57 and 5.21 %, respectively. Therefore, it can be concluded that there was no significant change in these HEB parameters in the case of transition from a homogeneous to a sectioned distribution of emission from the cathode.

Fig. 2 presents the data characterizing particle distribution in the central plane of cavity at $z = 260.5$ mm. Azimuthal positions of the HEB sectors with no electrons correspond to angle ranges of $115° < \theta < 157°$ and $295° < \theta < 337°$, where $\theta = 0°$ coincides with positive x-axis direction (see Fig. 2,*a*). As a result of the crossed electric and magnetic fields, these sectors experienced an azimuthal shift of approximately 18° in clockwise direction viewed along propagation of the HEB moving from the cathode to the cavity. An average potential depression due to the space charge ΔU is about 1.8 kV, with its minimum value located in the HEB areas adjacent to sectors without electrons (see Fig. 2,*a*). The energy spread δW, which is about 0.5 %, is mainly due to nonuniformity of the ΔU distribution in azimuthal direction. In comparison, the similar regime of the gyrotron operation with the homogeneous HEB is characterized by $\delta W = 0.1$ %. Under the action of the crossed azimuthal electric and longitudinal magnetic fields (diocotron effect), particles in areas close to the sectors without electrons move in the radial direction.

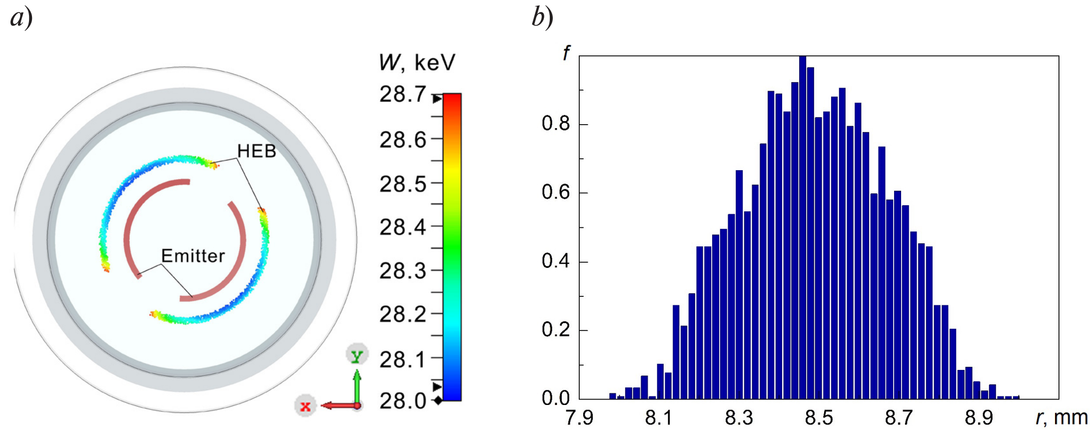


Fig. 2. Simulation results for particle distributions in the central plane of the cavity at $z = 260.5$ mm: positions of HEB particles with energy W in the $x - y$ plane (*a*) and the histogram of the particle radial positions (*b*).
Azimuthal positions of nonemitting sectors on the cathode are shown in Fig. 2,*a*

This movement causes an increase in the HEB wall thickness ΔR_b. As shown in Fig. 2,*b*, ΔR_b is approximately equal to 1 mm if it is determined by the full width of the distribution $f(r)$. In this regime, the radial spread of the leading Larmor centers is $\Delta R_g \approx 0.7$ mm, and the average Larmor radius is $r_1 \approx 0.17$ mm. In Ref. [23], it was shown that ΔR_g in a cavity should not exceed $\lambda/6$, where λ represents a wavelength of microwave radiation. The efficiency of an operating mode generation decreases and there is a possibility of exciting parasitic modes if a value of ΔR_g exceeds this limit.

During the electron-optical system analysis, a special Particle Export Interface Monitor was employed to collect data including the velocities and coordinates of particles in the plane $z = 222.5$ mm (see Fig. 1). Subsequently, this monitor's output was used as an input interface for simulation in the gyrotron cavity.

II. Microwave cavity

The interaction of an electron beam with the electromagnetic field in the cavity of the SPbPU gyrotron was simulated using PIC Solver. Calculation domain was defined by the planes $z = 222.5$ mm and $z = 320$ mm (see Fig. 1). The cavity with a regular part length of 28 mm and a radius of 14.45 mm was designed for the operating $TE_{12,3}$ mode. Simulation results indicated that the maximum output microwave power in the operating mode was achieved at $B_0 = 2.747$ T. The results discussed below were obtained at this magnetic field induction value.

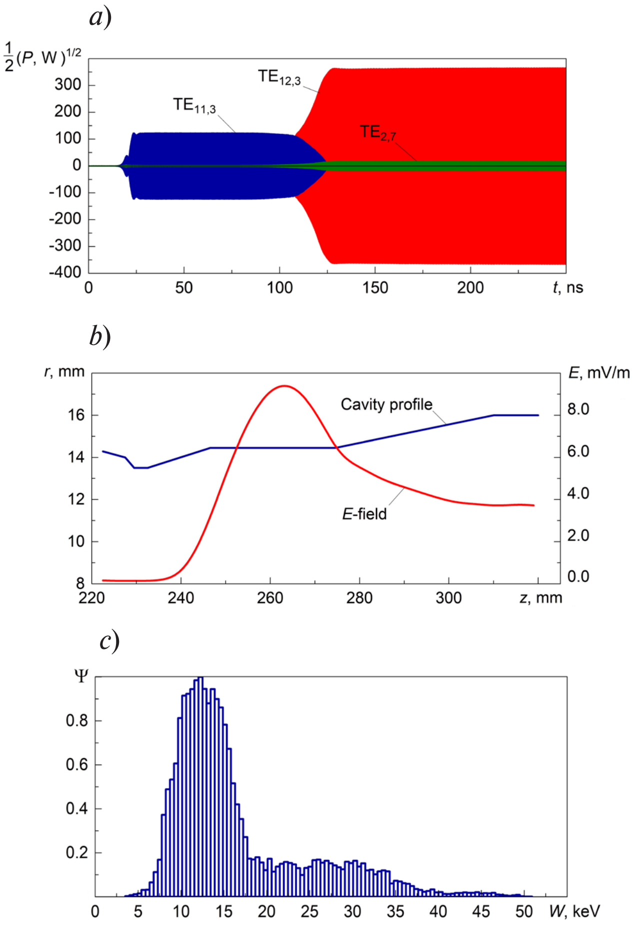


Fig. 3. Simulation results for interaction of an electron beam with the electromagnetic field in the cavity: (*a*) the time dependencies of signals of different modes in the output port ($z = 320$ mm); (*b*) the distributions of the wall radius r and the maximum E-value at 74.5 GHz along the z-axis; (*c*) electron energy spectrum of the spent beam (Ψ – normalized probability density, W – energy)

Fig. 3,*a* illustrates the time variation of the mode signals with the largest amplitude. It can be seen that there are two stable generation regions, namely, the former is with a time interval from 20 to 100 ns and the latter is with a time interval from approximately 130 ns to the simulation end at 250 ns. At $t = 100$ ns and 250 ns, the average output power values of P_{RF} are 15.5 kW and 134.8 kW, respectively. These two regions are distinguished by their mode composition in the cavity. In the first excitation region, the $TE_{11,3}$ mode with an azimuthal index one less than for the operating mode excited at a frequency of 71.5 GHz. Over time, this mode is suppressed simultaneously with excitation of the operating mode $TE_{12,3}$ at a frequency of 74.5 GHz. In the same time interval, the excitation of the parasitic mode $TE_{2,7}$ is also observed. Resonant frequencies of operating $TE_{12,3}$ and parasitic $TE_{2,7}$ modes were calculated using the Eigenmode Solver in CST Studio Suite and were equal to 74.83 and 74.94 GHz, respectively. All modes exhibit two polarization components, and each with approximately the same amplitudes, resulting in the circular wave polarization within the cavity.

At time $t = 250$ ns, the high-frequency power $P_{TE_{12,3}} = 133.9$ kW in the operating mode, and $P_{TE_{2,7}} = 0.3$ kW in the parasitic mode (see Fig. 3,*a*). One can also observe that the power ratio between operating and parasitic modes can be affected by the quality of mesh in the calculation model. We compared the power values of operating and parasitic modes obtained for sectioned and homogeneous HEBs under the same gyrotron operating regime and mesh settings. For the homogeneous HEB, the power values P_{RF} = 138.7 kW, $P_{\mathrm{TE}_{12,3}}$ = 137.6 kW, and $P_{\mathrm{TE}_{2,7}}$ = 0.2 kW. Thus, the HEB sectioning has a detrimental effect on the beam quality resulting in a decrease of total output power and an increase in the parasitic mode power. Nonetheless, this change in power is negligible, and the efficiency of the converting electron energy into the high-frequency field energy remains considerably high for the case of sectioned HEB. Specifically, at P_{RF} = 134.8 kW, U_0 = 30 kV, I_b = 10 A, the electronic efficiency η_{el} is determined to be 44.9 %. The data on trajectory analysis and PIC simulation in the cavity for uniform and sectioned electron beams are combined in Table 2.

Table 2

Comparison of the simulation results for homogeneous and sectioned helical electron beams

Parameter, notation, unit	Helical electron beam (HEB)	
	Homogeneous	Sectioned
HEB parameters in the central plane of the cavity (trajectory analysis)		
Beam current I_b, A	10	10
Average pitch factor α	1.57	1.56
Transverse velocity spread $\delta v_\perp$, %	5.21	5.32
Energy spread δW, %	0.1	0.5
Beam wall thickness ΔR_b, mm	1.00	0.75
Coefficient of reflection from magnetic mirror K_{ref}	–	$4\cdot10^{-4}$
Output radiation parameters (PIC simulation in the cavity)		
Average output power P_{RF}, kW	138.7	134.8
Power of the operating mode $P_{\mathrm{TE}_{12,3}}$, kW	137.6	133.9
Electronic efficiency η_{el}, %	46.2	44.9

Fig. 3,*b* presents a graph depicting the variation of *E*-field maximum amplitude at a frequency of 74.5 GHz with respect to longitudinal coordinate. The profile of the cavity $r(z)$ is also shown in Fig. 3,*b*. In the cone transition region after regular part of the cavity, where the high-frequency field converts into a traveling electromagnetic wave, an interaction occurs between the electrons and this wave, which is referred to as aftercavity interaction. It is known that this interaction causes an alteration in spent HEB energy spectrum, leading to a decrease in minimum electron energy [24]. The electron energy distribution of spent HEB, in turn, influences the maximum total efficiency that can be achieved through implementation of collector systems with residual energy recovery.

Particle 2D Monitor located in the z = 320 mm plane recorded data on the coordinates, velocities, and macro-charge of particles in the spent HEB required for trajectory analysis in the collector region. The monitor collected particle parameters during time interval $\Delta t = 3\cdot10^{-3}$ ns, resulting in an output file containing information on approximately $2\cdot10^4$ particles for every moment in time t. The energy spectrum obtained after processing of monitor data for t = 250 ns is presented in Fig. 3,*c*. The minimum electron energy is approximately equal to 15 % of eU_0. There is a noticeable number of accelerated particles with an energy exceeding eU_0 value. The electronic efficiency η_{el} can be estimated by known energy spectrum $f(W)$ using the formula

$$\eta_{el} = 1 - \frac{\int_0^\infty f(W) W dW}{eU_0}, \quad (1)$$

where $\int_0^\infty f(W) dW = 1$.

The efficiency obtained for the spectrum is η_{el} = 44.9 %, which matches the efficiency value obtained from the output microwave power.

III. Collector

Collector design. Recovery of the spent beam energy in the SPbPU gyrotron collector is based on spatial separation of HEB electron fractions with different energies in the crossed longitudinal electric E_z and azimuthal magnetic B_θ fields [12]. Previously, collectors with multistage recovery based on this method were developed for various gyrotrons [16, 25 – 27]. These collectors utilize a toroidal-type solenoid with outer and inner winding for generation of azimuthal magnetic field. Unlike multistage collectors with non-adiabatic fields (see, for example, Refs. [28 – 31]) or collectors with azimuthal electric field (see, for example, Refs. [10, 11]), the developed collectors have extended region with crossed E_z and B_θ fields, which allows to reduce negative influence of velocity and positional spreads of electrons and uncontrolled misalignment of electrodes and magnetic coils on collector efficiency.

The upgraded collector described in this paper differs from its original version presented in Ref. [16] by modified geometry of magnetic coils and collector sections. The data from simulation of similar collector for prototype gyrotron of the DEMO project [27] was used for modernization of the collector for the SPbPU gyrotron. The main elements of the collector for the SPbPU gyrotron are presented in Fig. 4. The cylindrical part of the collector body contains sections S1 – S4 under negative potentials used to create an electric field. Correcting coils C1 – C5, in combination with the gyrotron magnetic system including the main coil, cathode and collector ones, provide required distribution of longitudinal magnetic field. A toroidal solenoid is used to create an azimuthal magnetic field. The end conductors of this solenoid, from the side closest to the cavity, are assembled into two radial bundles located in the tubes providing connection of inner and outer winding. The inner radius of cylindrical part of the collector body is 104.5 mm. The longitudinal coordinate *z* corresponding to the end of transition from a conical part to cylindrical one of the collector is 667 mm. The coordinate *z* corresponding to the middle of connecting tubes with bundles is 619 mm. The described collector system has been already equipped in the SPbPU gyrotron. The sectioned emitter for the gyrotron was created by mechanically removing two azimuthal sectors, 45° each, from lanthanum hexaboride emissive strip on the cathode.

Optimization of magnetic field distribution in the collector region. During the process of searching for the optimal distribution of the magnetic field, adjustments were made to geometry and currents of the toroidal solenoid and the correcting coils C1 – C5. Originally, trajectories of “single” electrons starting in the plane z = 320 mm were analyzed. The initial energy and radial coordinate of these electrons were equal to 20 keV and 9 mm respectively. The initial azimuthal coordinate θ was varied. Fig. 5 shows projections of electron trajectories on the *r*–*z*

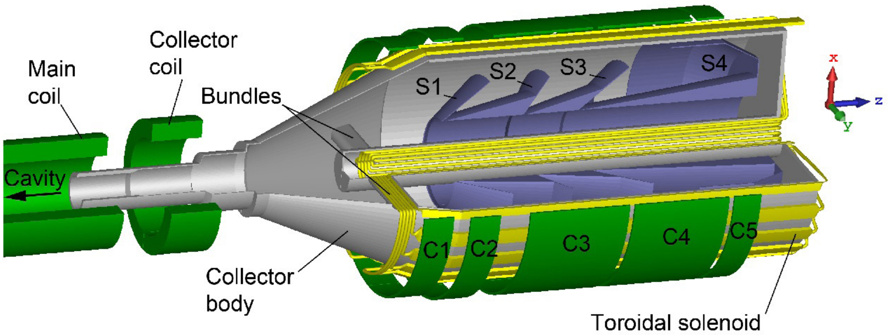


Fig. 4. Schematic drawing of the gyrotron collector region:
S1 – S4 are sections under negative potentials, C1 – C5 are correcting coils

plane for different values of θ from 0° to 180° (Fig. 5,*a*) and longitudinal distributions of different components of magnetic field (Fig. 5,*b*) obtained after optimization. The relative position of the electron emission points with regard to toroidal solenoid bundles can also be seen in Fig. 5,*a*. The bundles are located in the planes $\theta = 90°$ and 270°. Due to system symmetry, the electron trajectories in the range of θ from 180° to 360° will coincide with those shown in Fig. 5,*a*. Potentials of the collector sections were set to zero during these calculations.

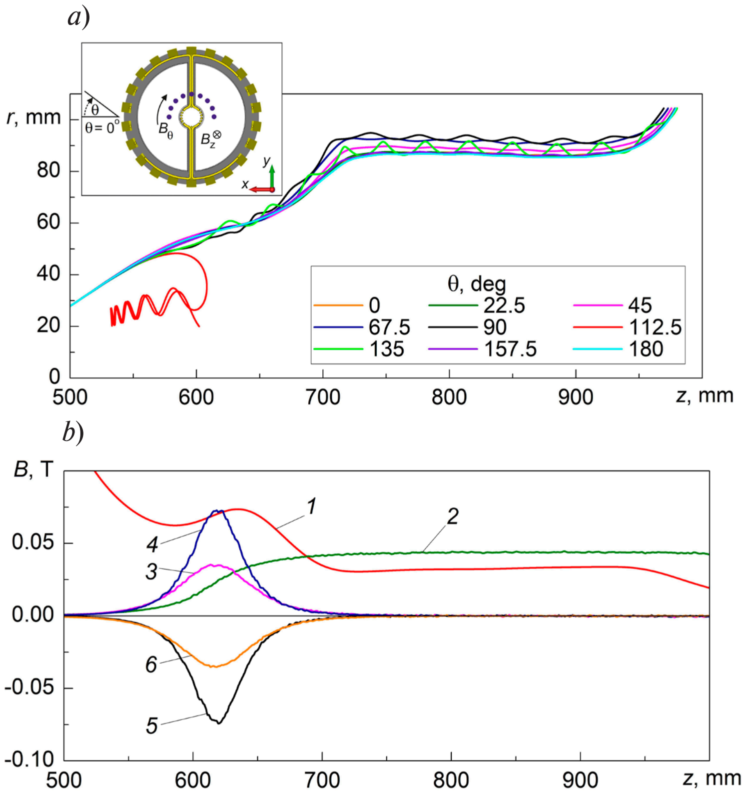


Fig. 5. Simulation results for search for the optimal distribution of the magnetic field *B*: (*a*) projections of electron trajectories with different azimuthal coordinates θ of the starting point; (*b*) the distributions of the *B*-field components (*B*-comps) along the *z*-axis.

Fig 5,*a*: there are azimuthal positions of the starting point of electrons and the bundles of toroidal solenoid in the $x - y$ plane.

Fig 5,*b*: there is data on the axial *B*-comp created by the main gyrotron magnetic system and correcting coils (*1*) as well as azimuthal (*2*) and axial (*3*–*6*) *B*-comps of the toroidal solenoid; the data was obtained at different coordinate values of *r*, mm and θ, degs:
80, 0.0 (*1*, *2*); 60, 45.0 (*3*); 60, 67.5 (*4*); 60, 112.5 (*5*); 60, 135.0 (*6*)

The efficient operation of the multistage collector requires minimizing the spread of radial positions of electron trajectories with different azimuthal coordinates at the collector entry in the absence of voltages on sections. Calculations for the DEMO gyrotron [27] showed that a decrease in the radial spread can be achieved by selecting a positive direction of the azimuthal magnetic field (see Fig. 5,*a*). The decrease can also be achieved by choosing a required magnetic induction value of the main gyrotron magnetic system and correcting coils in the area of toroidal solenoid bundles at $z \approx 620$ mm. The optimized distribution of magnetic field provides the small radial position spread in the recovery region ($z > 700$ mm), where the induction of longitudinal magnetic field B_z is approximately equal to 0.032 T and the azimuthal field B_θ is approximately 0.044 T at $r = 80$ mm.

However, after optimization, the certain number of electrons which propagate near the bundles of the toroidal solenoid are still present, and their trajectories are noticeably perturbed under the action of bundles' parasitic field. These electrons cannot reach the sections with potentials corresponding to their energies and settle on other electrodes of the collector. Alternatively, they may be reflected from the collector towards the cavity, reducing electronic efficiency. In either scenario, the total gyrotron efficiency is diminished. For example, an electron with the initial coordinate $\theta = 112.5°$ settles on the connecting tube in which the bundle is located (see Fig. 5,*a*). It can be seen that the total longitudinal magnetic field determined by the sum of B_z values at azimuth $\theta = 112.5°$ (curves *1* and *5*) is close to zero in the bundle region (see Fig. 5,*b*). To address this issue, the HEB was sectioned as described in Sections I and II to eliminate negative influence of such electrons on operation of the multistage collector. An additional displacement of the HEB in azimuthal direction during its movement between the planes $z = 260.5$ and 320 mm was insignificant and did not exceed 1°.

For further calculations, the toroidal solenoid was rotated 19° clockwise to achieve a minimum reflection of particles from the collector due to parasitic action of the magnetic field created by bundles' conductors.

Trajectory analysis in the collector with four-stage energy recovery. In the case of ideal separation, each fraction of spent HEB with energy *W* is deposited on the section under the most negative potential, the modulus of which does not exceed *eW* (*e* is the electron charge), and the collector body is under zero potential. The dependency of maximum total efficiency of the SPbPU gyrotron η_{max} achieved with ideal separation on the number of recovery stages *N* was calculated before the collector modeling. The spectrum of spent HEB shown in Fig. 3,*c* was used. For this calculation, the spectrum was divided into 1000 intervals with different energies. 1 % of the HEB current with electrons having the lowest energy was assumed to be reflected from the collector. The maximum total efficiency was achieved at optimal potentials of the sections U_i ($i = 1, 2, ..., N$) determined through iterations over the values of these potentials with a step of 0.2 kV. As in previous studies presented in [16, 25 – 27], the choice of four stages is dictated by a balance between the achieving maximum total efficiency of the gyrotron and practical difficulties associated with implementing a recovery system with a large number of stages. It should be noted that an increase in the number of collector sections does not substantially complicate the design of the described collector, unlike other designs with nonadiabatic fields [28 – 31].

Four cone-shaped sections are located in the cylindrical part of collector body (see Fig. 4). Changes in geometry of these sections compared with the original design described in Ref. [16] are due to modifications made to the collector magnetic system. Specifically, the direction of azimuthal magnetic field was changed to positive (see Fig. 5,*a*), so the sections were located in the region of smaller radii along the direction of electron drift in the crossed E_z and B_θ fields.

It should be noted that in the regime in the absence of the azimuthal magnetic field and zero voltage on the collector sections, the beam wall thickness in recovery region ($z > 700$ mm) is approximately 10 mm. With optimized distributions of azimuthal and axial magnetic fields and the length of the cathode's sectors without emission of 45° in the absence of voltages on the sections, approximately 94 % of the particles reached the final Section S4, 5 % deposited on the collector body, and less than 1 % deposited on Sections S1 – S3.

During a trajectory analysis in the collector, a Particle Import Interface was placed at the input plane $z = 320$ mm. It contained an array of particles that was determined during the simulation in the gyrotron cavity (as described in Section II). The initial potentials of collector sections $U_{S1} - U_{S4}$ were set equal to the optimal values obtained with ideal separation. Subsequently, through a series of electron trajectory calculations of spent HEB in the collector, these potential values were adjusted to achieve the maximum total efficiency of the gyrotron with an electron reflection coefficient from the collector less than 1 %. At $U_{S1} = -7.1$ kV, $U_{S2} = -10.7$ kV, $U_{S3} = -14.3$ kV, $U_{S4} = -25.2$ kV and $U_{coll} = 0$, the power dissipated over the collector sections and the body was $P_{S1} = 6.2$ kW, $P_{S2} = 6.2$ kW, $P_{S3} = 11.7$ kW, $P_{S4} = 10.2$ kW, and $P_{coll} = 1.2$ kW respectively, with the collector reflection coefficient of 0.99 %. Consequently, the total power P_{diss} dissipated on collector was 35.5 kW. At power $P_{RF} = 134.8$ kW, the total efficiency was

$$\eta_t = \frac{P_{RF}}{P_{RF} + P_{diss}} = 79.2\,\%, \tag{2}$$

and the collector efficiency was

$$\eta_t = 1 - \frac{P_{diss}}{U_0 I_b - P_{\mathrm{RF}}} = 78.5\ \%. \tag{3}$$

Thus, through optimization of the magnetic field distribution and the collector sections' geometry, the total efficiency over 79 % was achieved. This value is about 2 % less than the maximum efficiency in a four-stage recovery system with ideal separation of electrons with different energies. For comparison, the total efficiency was 71.8 % in the initial version of the collector for the SPbPU gyrotron [16].

Fig. 6 shows positions of particles in the $x - z$ plane, obtained as a result of intersection of the HEB trajectories with this plane. The picture demonstrates the drift of electrons in the radial direction by the action of crossed E_z and B_θ fields while propagating in the retarding electric field in the recovery region. The direction of field B_θ causes the drift towards smaller radii. Some of the electrons are deposited on the back walls of sections after changing their longitudinal movement direction. As the initial energy of electrons increases, they propagate a greater distance along the z-axis and deposit on sections with a more negative potential.

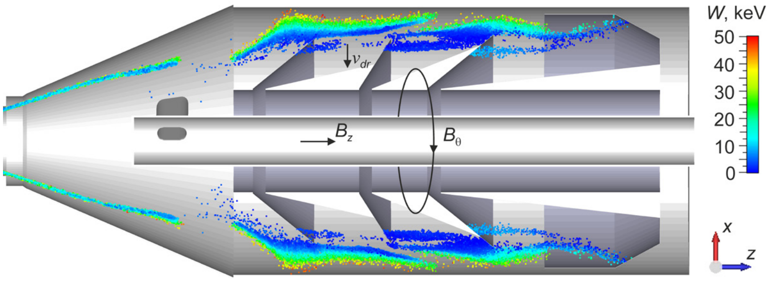


Fig. 6. Positions of particles in the plane x–z (the color corresponds to the particle energy W). The directions of the longitudinal B_z and the azimuthal B_θ magnetic fields and the electron drift velocity v_{dr} are shown

Conclusion

The present study consisted of complex simulation to investigate the possibility of achieving record values of the total efficiency for a moderate-power gyrotron operating in 4 mm wavelength range. High efficiency was achieved by enhancement of the HEB quality in the electron optical system and by recovering the residual electron energy using a multistage collector system. Parameters of the spent HEB were determined through a trajectory analysis in the electron optical system taking into account the spread of initial electron velocities at the cathode and simulation of interaction of formed HEB with a high-frequency field in the gyrotron cavity. Spatial separation of electron fractions with different energies in the collector was achieved using a method based on electron drift in the crossed longitudinal electric and azimuthal magnetic fields. A toroidal solenoid was used as a source of the azimuthal magnetic field. The end conductors of toroidal solenoid were assembled in bundles to increase the number of electrons passing to the recovery area. The negative influence of the magnetic field created by these bundles on the collector efficiency and the electron reflection coefficient was reduced through the sectioning of the electron beam.

It is important to underline the main differences between this study and the one described in Ref. [16] where the former version of the four-stage recovery collector for the SPbPU gyrotron was analyzed. In this study, a trajectory analysis in the electron optical system of the gyrotron has been performed considering the initial velocity spread of electrons on a cathode. As a consequence, characteristics of the beam entering the resonator, output radiation parameters, and, importantly for collector modeling, the spent electron beam parameters have undergone changes. The main distinction from Ref. [16] lies in the modification of the collector system's design. Alteration of the azimuthal magnetic field direction and optimization of the longitudinal magnetic field distribution using correcting coils enabled reducing the radial trajectory spread in the recovery region. Single-electron trajectory calculations in the collector region were employed for this purpose. The collector sections feature a new geometry, and their potentials were selected based on calculations of the maximum total efficiency with ideal separation of electrons of different energies. Compared to the results of Ref. [16], performed modernization of the collector for the SPbPU gyrotron allowed for an increase in calculated total efficiency from 71.8 to 79.2 % with a reflection coefficient from the collector of less than 1 % and for a reduction of the length of cathode gap sectors where emission is absent, from 70 to 45°. With incorporation of the new simulation data described in this work, an upgraded version of the collector for the SPbPU gyrotron has been manufactured.

Continuation of this work may involve further improvement of the azimuthal magnetic field source, which will simplify the design of the collector.

REFERENCES

1. **Thumm M. K. A., Denisov G. G., Sakamoto K., Tran M. Q.,** High-power gyrotrons for electron cyclotron heating and current drive, Nucl. Fusion. 59 (7) (2019) 073001.

2. **Thumm M.,** State-of-the-art of high-power gyro-devices and free electron masers, J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 41 (1) (2020) 1–140.

3. **Litvak A. G., Denisov G. G., Myasnikov V. E., et al.,** Development in Russia of megawatt power gyrotrons for fusion, J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 32 (3) (2011) 337–342.

4. **Darbos C., Albajar F., Bonicelli T., et al.,** Status of the ITER electron cyclotron heating and current drive system, J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 37 (1) (2016) 4–20.

5. **Jelonnek J., Aiello G., Alberti S., et al.,** Design considerations for future DEMO gyrotrons: A review on related gyrotron activities within EUROfusion, Fusion Eng. Des. 123 (November) (2017) 241–246.

6. **Sakamoto K., Tsuneoka M., Kasugai A., et al.,** Major improvement of gyrotron efficiency with beam energy recovery, Phys. Rev. Lett. 73 (26) (1994) 3532–3535.

7. **Glyavin M. Y., Kuftin A. N., Venediktov N. P., Zapevalov V. E.,** Experimental investigation of a 110 GHz/1 MW gyrotron with the one-step depressed collector, Int. J. Infrared Millim. Waves. 18 (11) (1997) 2129–2136.

8. **Manuilov V. N., Morozkin M. V., Luksha O. I., Glyavin M. Y.,** Gyrotron collector systems: Types and capabilities, Infrared Phys. Technol. 91 (June) (2018) 46–54.

9. **Pagonakis I. Gr., Hogge J.-P., Alberti S., et al.,** A new concept for the collection of an electron beam configured by an externally applied axial magnetic field, IEEE Trans. Plasma Sci. 36 (2) (2008) 469–480.

10. **Wu C., Pagonakis I. G., Avramidis K. A., et al.,** Gyrotron multistage depressed collector based on E×B drift concept using azimuthal electric field. I. Basic design, Phys. Plasmas. 25 (3) (2018) 033108.

11. **Ell B., Wu C., Gantenbein G., et al.,** Toward the first continuous wave compatible multistage depressed collector design for high power gyrotrons, IEEE Trans. Electron Devices. 70 (3) (2023) 1299–1305.

12. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** A method of electron separation for multistep recuperation systems in gyrotrons, Tech. Phys. Lett. 41 (9) (2015) 884–886.

13. **Louksha O. I., Piosczyk B., Sominski G. G., et al.,** On potentials of gyrotron efficiency enhancement: measurements and simulations on a 4-mm gyrotron, IEEE Trans. Plasma Sci. 34 (3) (2006) 502–511.

14. **Louksha O. I., Samsonov D. B., Sominskii G. G., Semin S. V.,** Dynamic processes in helical electron beams in gyrotrons, Tech. Phys. 58 (5) (2013) 751–759.

15. **Louksha O. I., Sominski G. G., Arkhipov A. V., et al.,** Gyrotron research at SPbPU: Diagnostics and quality improvement of electron beam, IEEE Trans. Plasma Sci. 44 (8) (2016) 1310–1319.

16. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** Highly efficient gyrotron with multi-stage recuperation of residual electron energy, Tech. Phys. 64 (12) (2019) 1889–1897.

17. **Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G.,** Trajectory analysis in a gyrotron electron-optical system with allowance for the cathode surface roughness, Radiophys. Quant. El. 65 (3) (2022) 209–218.

18. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** Simulation of non-uniform electron beams in the gyrotron electron-optical system, Tech. Phys. 63 (4) (2018) 598–604.

19. **Louksha O. I., Samsonov D. B., Sominskii G. G., Tsapov A. A.,** Improvement of the helical electron beam quality and the gyrotron efficiency by controlling the electric field distribution near a magnetron injection gun, Tech. Phys. 57 (6) (2012) 835–839.

20. **Tsimring Sh. E.,** Gyrotron electron beams: velocity and energy spread and beam instabilities, Int. J. Infrared Millim. Waves. 22 (10) (2001) 1433–1468.

21. **Manuilov V. N.,** Numerical simulation of low-frequency oscillations of the space charge and potential in the electron-optical system of a gyrotron, Radiophys. Quant. El. 49 (10) (2006) 786–792.

22. **Louksha O. I.,** Simulation of low-frequency collective processes in gyrotron electron beams, Radiophys. Quant. El. 52 (5–6) (2009) 386–397.

23. **Pu R., Nusinovich G. S., Sinitsyn O. V., Antonsen T. M. Jr.,** Effect of the thickness of electron beams on the gyrotron efficiency, Phys. Plasmas. 17 (8) (2010) 083105.

24. **Zapevalov V. E., Moiseev M. A.,** Influence of aftercavity interaction on gyrotron efficiency, Radiophys. Quant. El. 47 (7) (2004) 520–527.

25. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** A multistage depressed collector system for gyrotrons, Proc. 18th Int. Vacuum Electronics Conf. (IVEC), April 24–26, London, UK (2017) 1–2.

26. **Louksha O. I., Trofimov P. A., Manuilov V. N., Glyavin M. Yu.,** Trajectory analysis in a collector with multistage energy recovery for a DEMO prototype gyrotron. Part I. Idealized magnetic field distribution, Tech. Phys. 66 (1) (2021) 118–123.

27. **Louksha O. I., Trofimov P. A., Manuilov V. N., Glyavin M. Yu.,** Trajectory analysis in a collector with multistage energy recovery for a DEMO prototype gyrotron. Part II. Toroidal magnetic field, Tech. Phys. 66 (8) (2021) 992–998.

28. **Read M. E., Lawson W. G., Dudas A. J., Singh A.,** Depressed collectors for high-power gyrotrons, IEEE Trans. Electron Devices. 37 (6) (1990) 1579–1589.

29. **Singh A., Rajapatirana S., Men Y., et al.,** Design of a multistage depressed collector system for 1-MW CW gyrotrons. I. Trajectory control of primary and secondary electrons in a two-stage depressed collector, IEEE Trans. Plasma Sci. 27 (2) (1999) 490–502.

30. **Ling G., Piosczyk B., Thumm M. K.,** A new approach for a multistage depressed collector for gyrotrons, IEEE Trans. Plasma Sci. 28 (3) (2000) 606–613.

31. **Glyavin M. Y., Morozkin M. V., Petelin M. I.,** Separation of energy fractions of an electron beam by a localized nonuniformity of magnetic field in the collector region of gyrodevices, Radiophys. Quant. El. 49 (10) (2006) 811–815.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Thumm M. K. A., Denisov G. G., Sakamoto K., Tran M. Q.** High-power gyrotrons for electron cyclotron heating and current drive // Nuclear Fusion. 2019. Vol. 59. No. 7. P. 073001.

2. **Thumm M.** State-of-the-art of high-power gyro-devices and free electron masers // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2020. Vol. 41. No. 1. Pp. 1–140.

3. **Litvak A. G., Denisov G. G., Myasnikov V. E., Tai E. M., Azizov E. A., Ilin V. I.** Development in Russia of megawatt power gyrotrons for fusion // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2011. Vol. 32. No. 3. Pp. 337–342.

4. **Darbos C., Albajar F., Bonicelli T., et al.** Status of the ITER electron cyclotron heating and current drive system // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2016. Vol. 37. No. 1. Pp. 4–20.

5. **Jelonnek J., Aiello G., Alberti S., et al.** Design considerations for future DEMO gyrotrons: A review on related gyrotron activities within EUROfusion // Fusion Engineering and Design. 2017. Vol. 123. November. Pp. 241–246.

6. **Sakamoto K., Tsuneoka M., Kasugai A., Imai T., Kariya T., Hayashi K., Mitsunaka Y.** Major improvement of gyrotron efficiency with beam energy recovery // Physical Review Letters. 1994. Vol. 73. No. 26. Pp. 3532–3535

7. **Glyavin M. Y., Kuftin A. N., Venediktov N. P., Zapevalov V. E.** Experimental investigation of a 110 GHz / 1 MW gyrotron with the one-step depressed collector // International Journal of Infrared and Millimeter Waves. 1997. Vol. 18. No. 11. Pp. 2129–2136.

8. **Manuilov V. N., Morozkin M. V., Luksha O. I., Glyavin M. Y.** Gyrotron collector systems: Types and capabilities// Infrared Physics & Technology. 2018. Vol. 91. June. Pp. 46–54.

9. **Pagonakis I. Gr., Hogge J.-P., Alberti S., Avramides K. A., Vomvoridis J. L.** A new concept for the collection of an electron beam configured by an externally applied axial magnetic field // IEEE Transactions on Plasma Science. 2008. Vol. 36. No. 2. Pp. 469–480.

10. **Wu C., Pagonakis I. G., Avramidis K. A., Gantenbein G., Illy S., Thumm M., Jelonnek J.** Gyrotron multistage depressed collector based on E×B drift concept using azimuthal electric field. I. Basic design // Physics of Plasmas. 2018. Vol. 25. No. 3. P. 033108.

11. **Ell B., Wu C., Gantenbein G., Illy S., Misko M. S., Pagonakis I. Gr., Weggen J., Thumm M., Jelonnek J.** Toward the first continuous wave compatible multistage depressed collector design for high power gyrotrons // IEEE Transactions on Electron Devices. 2023. Vol. 70. No. 3. Pp.1299–1305.

12. **Лукша О. И., Трофимов П. А.** Метод сепарации электронов для систем многоступенчатой рекуперации в гиротронах // Письма в Журнал технической физики. 2015. Т. 41. № 18. С. 38–45.

13. **Louksha O. I., Piosczyk B., Sominski G. G., Thumm M. K., Samsonov D. B.** On potentials of gyrotron efficiency enhancement: measurements and simulations on a 4-mm gyrotron // IEEE Transactions on Plasma Science. 2006. Vol. 34. No. 3. Pp. 502–511.

14. **Лукша О. И., Самсонов Д. Б., Соминский Г. Г., Сёмин С. В.** Динамические процессы в винтовых электронных потоках гиротронов // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. № 5. С. 132–140.

15. **Louksha O. I., Sominski G. G., Arkhipov A. V., Dvoretskaya N. G., Kolmakova N. V., Samsonov D. B., Trofimov P. A.** Gyrotron research at SPbPU: Diagnostics and quality improvement of electron beam // IEEE Transactions on Plasma Science. 2016. Vol. 44. No. 8. Pp. 1310–1319.

16. **Лукша О. И., Трофимов П. А.** Высокоэффективный гиротрон с многоступенчатой рекуперацией остаточной энергии электронов // Журнал технической физики. 2019. Т. 89. № 12. С. 1988–1996.

17. **Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г.** Траекторный анализ в электронно-оптической системе гиротрона с учетом шероховатости поверхности катода // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2022. Т. 65. № 3. С. 226–237.

18. **Лукша О. И., Трофимов П. А.** Моделирование неоднородных электронных потоков в электронно-оптической системе гиротрона // Журнал технической физики. 2018. Т. 88. № 4. С. 614–620.

19. **Лукша О. И., Самсонов Д. Б., Соминский Г. Г., Цапов А. А.** Повышение качества винтового электронного потока и кпд гиротрона при регулировании распределения электрического поля в области магнетронно-инжекторной пушки // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. № 6. С. 101–105.

20. **Tsimring Sh. E.** Gyrotron electron beams: velocity and energy spread and beam instabilities // International Journal of Infrared and Millimeter Waves. 2001. Vol. 22. No. 10. Pp. 1433–1468.

21. **Мануилов В. Н.** Численное моделирование низкочастотных колебаний пространственного заряда и потенциала в электронно-оптической системе гиротрона // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 10. С. 872–879.

22. **Лукша О. И.** Моделирование низкочастотных коллективных процессов в электронных потоках гиротронов // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2009. Т. 52. № 5–6. С. 425–437.

23. **Pu R., Nusinovich G. S., Sinitsyn O. V., Antonsen T. M. Jr.** Effect of the thickness of electron beams on the gyrotron efficiency // Physics of Plasmas. 2010. Vol. 17. No. 8. P. 083105.

24. **Запевалов В. Е., Моисеев М. А.** Влияние послерезонаторного взаимодействия на кпд гиротрона // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2004. Т. 47. № 7. С. 584–592.

25. **Louksha O. I., Trofimov P. A.** A multistage depressed collector system for gyrotrons, Proceedings of the 18th International Vacuum Electronics Conference (IVEC), April 24–26, London, UK (2017) 1–2.

26. **Лукша О. И., Трофимов П. А., Мануилов В. Н., Глявин М. Ю.** Траекторный анализ в коллекторе с многоступенчатой рекуперацией энергии для прототипа гиротрона DEMO. Часть I. Идеализированное распределение магнитного поля // Журнал технической физики. 2021. Т. 91. № 1. С. 125–130.

27. **Лукша О. И., Трофимов П. А., Мануилов В. Н., Глявин М. Ю.** Траекторный анализ в коллекторе с многоступенчатой рекуперацией энергии для прототипа гиротрона DEMO. Часть II. Тороидальное магнитное поле // Журнал технической физики. 2021. Т. 91. № 7. С. 1182–1188.

28. **Read M. E., Lawson W. G., Dudas A. J., Singh A.** Depressed collectors for high-power gyrotrons // IEEE Transactions on Electron Devices. 1990. Vol. 37. No. 6. Pp. 1579–1589.

29. **Singh A., Rajapatirana S., Men Y., Granatstein V. L., Ives R. L., Antolak A. J.** Design of a multistage depressed collector system for 1-MW CW gyrotrons. I. Trajectory control of primary and secondary electrons in a two-stage depressed collector // IEEE Transactions on Plasma Science. 1999. Vol. 27. No. 2. Pp. 490–502.

30. **Ling G., Piosczyk B., Thumm M. K.** A new approach for a multistage depressed collector for gyrotrons // IEEE Transactions on Plasma Science. 2000. Vol. 28. No. 3. Pp. 606–613.

31. **Глявин М. Ю., Морозов М. В., Петелин М. И.** Разделение энергетических фракций электронного пучка локализованной неоднородностью магнитного поля в коллекторной области гироприборов // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 10. С. 900–905.

THE AUTHORS

LOUKSHA Oleg I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
louksha@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-6402-8112

TROFIMOV Pavel A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
trofpa@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3585-1169

MALKIN Alexander G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexmalkin47@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4047-3956

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛУКША Олег Игоревич – *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
louksha@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-6402-8112

ТРОФИМОВ Павел Анатольевич – *кандидат физико-математических наук, инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
trofpa@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3585-1169

МАЛКИН Александр Геннадьевич – *студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexmalkin47@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4047-3956

Received 09.09.2023. Approved after reviewing 18.09.2023. Accepted 18.09.2023.

Статья поступила в редакцию 09.09.2023. Одобрена после рецензирования 18.09.2023. Принята 18.09.2023.

Научная статья
УДК 537.534.7, 543.51
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16411

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЖИМОВ РАБОТЫ РАДИОЧАСТОТНЫХ ВОРОНОК В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ИНТЕРФЕЙСАХ ТАНДЕМНЫХ ТРЕХКВАДРУПОЛЬНЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ

А. А. Сысоев [1]✉, А. С. Бердников [2], С. В. Масюкевич [2],
К. В. Соловьев [3, 2], Н. К. Краснова [3]

[1] Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия;
[2] Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия;
[3] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ aasysoyev@mephi.ru

Аннотация. В статье рассмотрены аналитические модели высокочастотных электрических полей, которые можно эффективно использовать для быстрого качественного моделирования процессов фокусировки и транспорта ионных потоков в радиочастотных воронках. В частности, применение таких устройств в конструкции тандемного трехквадрупольного масс-спектрометра увеличивает количество ионов, собираемых в форвакуумной области газодинамического интерфейса электроспрейного источника ионов. Проанализированы случаи функционирования воронок с двух- и четырехфазными электрическими напряжениями (варианты I и II), а также с амплитудно-модулированными электрическими напряжениями, обеспечивающими режим псевдопотенциала с архимедовой волной (III). В результате проведенного анализа наиболее предпочтительной конструкцией оказался III вариант. Использование подобных аналитических моделей позволяет эффективно проверять перспективные варианты и тем самым существенно снизить трудозатраты на предварительный выбор принципиальной схемы устройства с заданными характеристиками, в том числе и в других масс-спектрометрических разработках.

Ключевые слова: масс-спектрометрия, источник ионов, электрораспыление, газодинамический интерфейс, радиочастотная ловушка, тандемный трехквадрупольный масс-спектрометр

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-03-2023-097.

Для цитирования: Сысоев А. А., Бердников А. С., Масюкевич С. В., Соловьев К. В., Краснова Н. К. Аналитическое исследование режимов работы радиочастотных воронок в газодинамических интерфейсах тандемных трехквадрупольных масс-спектрометров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 134–145. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16411

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16411

ANALYTICAL STUDY OF OPERATING MODES OF RF ION FUNNELS IN THE GAS DYNAMIC INTERFACES OF TANDEM TRIPLE-QUADRUPOLE MASS-SPECTROMETERS

A. A. Sysoev [1] ✉, A. S. Berdnikov [2], S. V. Masyukevich [2],
K. V. Solovyev [3, 2], N. K. Krasnova [3]

[1] National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),
Moscow, Russia;
[2] Institute for Analytical Instrumentation of RAS, St. Petersburg, Russia;
[3] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ aasysoyev@mephi.ru

Abstract. The article considers analytical models of high-frequency electric fields which can be used effectively for fast, high-quality simulation of ion flow focusing and transport processes in the radio-frequency funnels. In particular, the use of such devices in the design of a tandem three-quadrupole mass spectrometer increases the amount of ions collected in the forevacuum region of the gas-dynamic interface of the electrospray ion source. The cases of funnels with two- and four-phase electrical voltages (options I and II), as well as with amplitude-modulated electrical voltages providing a pseudopotential mode with an Archimedean wave (III) have been analyzed. As a result, the most preferable design turned out to be option III. The use of such analytical models makes it possible to test effectively promising options and thereby significantly reduce costs for the preliminary selection of a principal scheme of a device with specified characteristics, including similar cases of other mass spectrometric designs.

Keywords: mass spectrometry, gas dynamic interface, radio-frequency trap, tandem mass spectrometer, triple-quadrupole mass-spectrometer

Funding: The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-03-2023-097).

For citation: Sysoev A. A., Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Solovyev K. V., Krasnova N. K., Analytical study of operating modes of RF ion funnels in the gas dynamic interfaces of tandem triple-quadrupole mass-spectrometers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 134–145. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16411

Введение

В статье рассматривается один из элементов тандемного трехквадрупольного масс-анализатора с ионизацией электрораспылением, а именно – радиочастотная воронка, размещаемая в форвакуумной области газодинамического интерфейса источника ионов. Ведущим исполнителем разработки такого масс-спектрометра, которая проводится в настоящее время в рамках федерального проекта «Развитие отечественного приборостроения гражданского назначения для научных исследований», осуществляемого под патронажем Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, является Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ [1 – 10].

Особенности функционирования радиочастотных фокусирующих воронок [11], предназначенных для снижения потерь ионов в газодинамическом интерфейсе источника ионов, изучаются в данной работе с помощью аналитических моделей. Прямое моделирование такого устройства требует, к сожалению, интенсивных ресурсоемких компьютерных расчетов. Использование же аналитических моделей хотя и обеспечивает лишь качественные, а не количественные результаты функционирования воронок, позволяет эффективно отбирать перспективные направления оптимизации итогового конструктивного решения. Тем самым можно существенно уменьшить трудозатраты на первичный отбор перспективных вариантов, а в конечном счете добиться существенно лучших характеристик итогового варианта конструкции.

В работе исследуются аналитические модели высокочастотных электрических полей радиочастотных воронок и на этой основе делается предварительный выбор, каким может быть базовое конструктивное решение такого элемента газодинамического интерфейса источника ионов с электрораспылением. При этом принимаются решения о перспективности той или иной конструкции. Настоящая статья имеет статус краткого научного сообщения; более подробно эти результаты будут представлены в виде отдельной публикации.

Модельные электрические поля для каналов транспортировки с круговыми диафрагмами

Радиочастотные электрические ловушки типа SRIG (Stacked Ring Ion Guide), подробно рассмотренные в статьях [12, 13], представляют собой цепочку круговых диафрагм (рис. 1), к которым прикладываются высокочастотные электрические напряжения с противоположными фазами на соседних диафрагмах.

Для этих устройств запирающее действие радиочастотного электрического поля при удалении от оси и приближении к границам электродов растет экспоненциально с расстоянием, тогда как для обычных мультипольных радиочастотных ловушек с длинными цилиндрическими электродами запирающее действие подобного электрического поля при удалении от оси и приближении к границам электродов растет полиномиально. Тем самым ловушки типа SRIG обеспечивают более надежное удержание заряженных частиц (в нашем случае ионов), чем классические мультипольные радиочастотные ловушки.

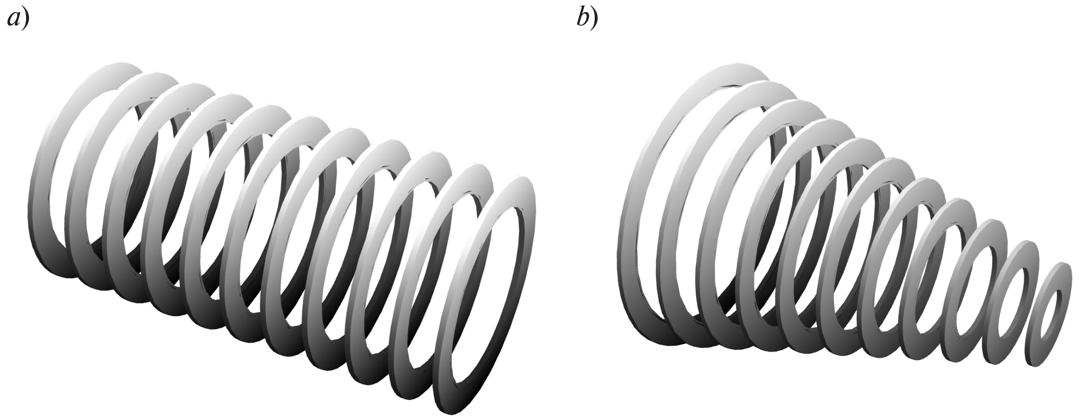


Рис. 1. Электродные конфигурации радиочастотных ловушек типа SRIG с цилиндрическим (*a*) и коническим (*b*) каналами удержания и транспортировки ионов

Для классической радиочастотной электрической ловушки типа SRIG с диафрагмами одинакового радиуса (см. рис. 1,*a*), у которой разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна π, электрический потенциал $U(z, r, t)$ вблизи оси описывается с хорошей точностью любой из двух формул:

$$U(z,r,t)=U_C(z,r)\cos(\omega t+\varphi),\ U(z,r,t)=U_S(z,r)\cos(\omega t+\varphi), \tag{1}$$

где

$$U_C(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right),$$
$$U_S(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right). \tag{2}$$

В формулах (1), (2) U_R, ω, φ – амплитуда, круговая частота и фаза радиочастотных напряжений, приложенных к электродам; R – внутренний радиус круговых диафрагм; L – расстояние между соседними диафрагмами; $r=\sqrt{x^2+y^2}$ – расстояние в радиальном направлении до оси от точки с декартовыми пространственными координатами (x, y, z); t – время; I_0 – модифицированная функция Бесселя нулевого порядка [14].

Для радиочастотной ловушки с конически сужающимся каналом транспортировки (см. рис. 1,*b*), у которого разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна π, электрический потенциал вблизи оси с хорошей точностью описывается любой из двух формул:

$$V(z,r,t)=V_C(z,r)\cos(\omega t+\varphi),\quad V(z,r,t)=V_S(z,r)\cos(\omega t+\varphi), \tag{3}$$

где

$$\begin{gathered}V_C(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\left[z\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)+r\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right)\right],\\ V_S(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\left[z\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)-r\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right)\right].\end{gathered} \tag{4}$$

В этих формулах к прежним обозначениям добавляется I_1 – модифицированная функция Бесселя первого порядка [14].

В случае необходимости, когда для достижения того или иного дополнительного эффекта требуется нелинейным образом модифицировать электрическое поле воронки, можно использовать аддитивные корректирующие поправки, квадратичные по координате z. При внесении подобных искажений поля, соответствующим образом должна изменяться и конструкция воронки, т. е. положения и диаметры отдельных круговых диафрагм. Задача расчета положения и формы электродов по заданному электрическому полю является элементарной, в отличие от противоположной задачи, что еще раз показывает преимущества аналитического подхода с использованием модельных распределений электрического поля.

Для аналитического описания корректирующего потенциала $W(z, r, t)$ с квадратичной зависимостью от координаты z (вдоль оси устройства) можно воспользоваться любой из этих формул:

$$W(z,r,t)=W_C(z,r)\cos(\omega t+\varphi),\quad W(z,r,t)=W_S(z,r)\cos(\omega t+\varphi), \tag{5}$$

где

$$\begin{gathered}W_C(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\left\{z^2\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)+2zr\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right)-\right.\\ \left.-\frac{1}{2}r^2\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)\left[I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)+I_2\left(\frac{\pi r}{L}\right)\right]\right\},\\ W_S(z,r)=\frac{U_R}{I_0(\pi R/L)}\left\{z^2\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)-2zr\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right)-\right.\\ \left.-\frac{1}{2}r^2\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)\left[I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)+I_2\left(\frac{\pi r}{L}\right)\right]\right\},\end{gathered} \tag{6}$$

I_2 – модифицированная функция Бесселя второго порядка [14].

Чтобы проверить, удовлетворяют ли функции (2), (4), (6) трехмерному уравнению Лапласа и, следовательно, могут ли они рассматриваться как электрические потенциалы некоторого электростатического поля, можно воспользоваться программой Wolfram Mathematica [15], обеспечивающей эффективный инструмент для символьных вычислений.

Примечание. Для формул модельных электрических потенциалов (1), (3), (5) использовано предположение о квазистатичности высокочастотного электрического поля. Оно справедливо, когда время характерного изменения электрических напряжений на электродах существенно превышает время распространения электромагнитного возмущения в пределах устройства. Типичные размеры электродных конфигураций, используемых в конструкциях масс-спектрометров, составляют десятки сантиметров. С учетом равенства скорости света и скорости распространения электромагнитного возмущения, это предположение заведомо выполняется для частот электрических напряжений, используемых в масс-спектрометрах (они составляют несколько гигагерц). В таком случае высокочастотный электрический потенциал, изменяющийся во времени и пространстве, можно выразить в виде произведения функции от времени (она описывает временнóе изменение электрических напряжений) на электростатический потенциал (соответствует постоянным напряжениям на электродах). Такой шаг есть, по сути, пренебрежение электродинамическими эффектами, т. е. сопутствующей электромагнитной волной.

Псевдопотенциальная модель движения ионов при наличии эффекта вязкого трения

Для качественного описания движения заряженных частиц в высокочастотных электрических полях полезно использовать псевдопотенциальную модель движения, согласно которой движение распадается на сумму из двух слагаемых: «медленной» составляющей в некотором эффективном квазистационарном силовом поле и движения в форме высокочастотных осцилляций с малой амплитудой.

Пусть рассматривается движение ионов в высокочастотном электрическом поле, потенциал которого имеет вид [16]:

$$\begin{aligned} U_{rf}\left(x,y,z,t\right)=\sum_{k}\Big[&p_k\left(t\right)\cos\left(\omega_k t+\varphi_k\right)U^{(k)}\left(x,y,z\right)+\\ &+q_k\left(t\right)\sin\left(\omega_k t+\varphi_k\right)V^{(k)}\left(x,y,z\right)\Big], \end{aligned} \tag{7}$$

где p_k (t), q_k (t) – «медленные» функции времени; ω_k – «быстрые» частоты, далеко отстоящие друг от друга на частотной шкале; $U^{(k)}(x, y, z)$, $V^{(k)}(x, y, z)$ – электростатические поля, соответствующие постоянным электрическим напряжениям на электродах устройства.

Здесь стоит отметить, что понятия «медленные», «быстрые» и «далеко отстоящие» соотносятся с характерным временем T_0 перемещения ионов в транспортирующем канале:

$$dp_k\left(t\right)/dt\sim 1/T_0,\ dq_k\left(t\right)/dt\sim 1/T_0,\ \omega_k>>1/T_0,\ \forall i\neq j:\left|\omega_i-\omega_j\right|>>1/T_0\Big),$$

в соответствии с псевдопотенциальной моделью движения ионов (см. статьи [16, 18] и библиографию в них).

В присутствии нейтрального газа, его действие можно заменить наличием эффективного вязкого трения, сила которого задается законом Стокса [17]. Далее, e, m – заряд и масса иона; $\Omega=\gamma/m$ – эффективная частота столкновений ионов с молекулами нейтрального газа ($\gamma = \gamma$ (x, y, z, t) – коэффициент Стокса для эффективной вязкости, обусловленной столкновениями ионов с молекулами нейтрального газа в окрестности рассматриваемой точки пространства в рассматриваемый момент времени; этот коэффициент медленно меняется во времени и не зависит (в первом приближении) от относительной скорости ионов).

В дальнейших выкладках нижние индексы при функциях $U^{(k)}(x, y, z)$ и $V^{(k)}(x, y, z)$ будут обозначать частные производные потенциалов по соответствующим пространственным переменным, аргументы потенциалов для краткости будут опущены.

После аккуратного усреднения уравнений движения в высокочастотном электрическом поле оказывается, что упомянутое медленное движение иона осуществляется в псевдопотенциальном электрическом поле с псевдопотенциалом $\overline{U}\left(x,y,z,t\right)$, который обусловлен пространственным градиентом амплитуды высокочастотного электрического поля. Этот псевдопотенциал выражается как [18]:

$$\begin{aligned}\bar{U}(x,y,z,t)=\sum_k \frac{e}{4m\left(\Omega^2+\omega_k^2\right)}\Bigg\{&p_k^2(t)\left[\left(U_x^{(k)}\right)^2+\left(U_y^{(k)}\right)^2+\left(U_z^{(k)}\right)^2\right]+\\&+q_k^2(t)\left[\left(V_x^{(k)}\right)^2+\left(V_y^{(k)}\right)^2+\left(V_z^{(k)}\right)^2\right]\Bigg\}.\end{aligned} \tag{8}$$

Кроме того, в уравнениях медленного движения присутствует непотенциальное псевдоэлектрическое поле с компонентами $\left(\bar{E}_X,\bar{E}_Y,\bar{E}_Z\right)$, связанное с наличием вязкого трения и с пространственным градиентом фазы высокочастотного электрического поля:

$$\begin{aligned}\bar{E}_X(x,y,z,t)=\sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m\left(\Omega^2+\omega_k^2\right)}p_k(t)q_k(t)\Big(&U_x^{(k)}V_{xx}^{(k)}-U_{xx}^{(k)}V_x^{(k)}+\\&+U_y^{(k)}V_{xy}^{(k)}-U_{xy}^{(k)}V_y^{(k)}+U_z^{(k)}V_{xz}^{(k)}-U_{xz}^{(k)}V_z^{(k)}\Big),\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}_Y(x,y,z,t)=\sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m\left(\Omega^2+\omega_k^2\right)}p_k(t)q_k(t)\Big(&U_x^{(k)}V_{xy}^{(k)}-U_{xy}^{(k)}V_x^{(k)}+\\&+U_y^{(k)}V_{yy}^{(k)}-U_{yy}^{(k)}V_y^{(k)}+U_z^{(k)}V_{yz}^{(k)}-U_{yz}^{(k)}V_z^{(k)}\Big),\end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}_Z(x,y,z,t)=\sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m\left(\Omega^2+\omega_k^2\right)}p_k(t)q_k(t)\Big(&U_x^{(k)}V_{xz}^{(k)}-U_{xz}^{(k)}V_x^{(k)}+\\&+U_y^{(k)}V_{yz}^{(k)}-U_{yz}^{(k)}V_y^{(k)}+U_z^{(k)}V_{zz}^{(k)}-U_{zz}^{(k)}V_z^{(k)}\Big).\end{aligned} \tag{11}$$

Кроме этих псевдосил, в уравнения медленного движения входит также сила вязкого трения (изначально в них присутствовавшая) с компонентами $\left(\bar{F}_X,\bar{F}_Y,\bar{F}_Z\right)$:

$$\begin{aligned}\bar{F}_X(x,y,z,t)&=-\gamma(x,y,z,t)\left[\dot{x}(t)-u_X(x,y,z,t)\right],\\ \bar{F}_Y(x,y,z,t)&=-\gamma(x,y,z,t)\left[\dot{y}(t)-u_Y(x,y,z,t)\right],\\ \bar{F}_Z(x,y,z,t)&=-\gamma(x,y,z,t)\left[\dot{z}(t)-u_Z(x,y,z,t)\right],\end{aligned} \tag{12}$$

где (u_X, u_Y, u_Z) – компоненты скорости потока газа (она медленно меняется во времени) в окрестности рассматриваемой точки пространства в рассматриваемый момент времени; $\dot{x},\dot{y},\dot{z}$ – компоненты скорости медленного (усредненного по быстрым осцилляциям) движения иона.

Анализ свойств конической воронки с двухфазным питанием

Используем псевдопотенциальную модель для описания движения ионов в высокочастотном электрическом поле (3). Псевдопотенциал вычисляется по общей формуле (8). Пространственный градиент фазы высокочастотного электрического поля в данном случае отсутствует, так что мы имеем дело с непотенциальной псевдоэлектрической силой. Трехмерный график псевдопотенциала имеет форму некого желоба с краями, резко растущими при удалении от оси и приближении к электродам, причем наклон краев желоба растет по мере приближения к выходу из воронки. Это означает, что такое высокочастотное электрическое поле эффективно «прижимает» ионы к оси устройства, и это прижимающее усилие существенно возрастает по ходу движения, делая пучок ионов все более узким.

Неприятным эффектом можно считать наличие гофрировки псевдопотенциала на оси системы, так как она может создавать паразитные локальные ловушки для ионов. Кроме того, в такой конструкции не приходится надеяться на охлаждение ионов (сброс их избыточной кинетической энергии), поскольку высокочастотное электрическое поле на оси не равно нулю и, значит, ионы постоянно раскачиваются этим полем.

Помимо этих недостатков, распределение псевдопотенциальной функции по оси воронки медленно растет к ее выходу, что будет тормозить движение ионов и затруднять их выход через выходное отверстие. Для такой воронки оказывается необходимым прикладывать дополнительное тянущее электрическое поле. Такую меру можно реализовать, если к диафрагмам прикладывать дополнительные статические потенциалы и обеспечивать постоянное приращение статического электрического потенциала между соседними диафрагмами.

Анализ свойств конической воронки с четырехфазным питанием

Для радиочастотной ловушки с коническими электродами (см. рис. 1,*b*), у которой разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна π/2, электрический потенциал вблизи оси с хорошей точностью описывается выражением

$$V\left(z,r,t\right)=V_C^*\left(z,r\right)\cos\left(\omega t+\varphi\right)+V_S^*\left(z,r\right)\sin\left(\omega t+\varphi\right), \qquad (13)$$

где

$$\begin{aligned} V_C^*\left(z,r\right)&=\frac{U_R}{I_0\left(\pi R/2L\right)}\left[z\cos\left(\frac{\pi z}{2L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{2L}\right)+r\sin\left(\frac{\pi z}{2L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{2L}\right)\right],\\ V_S^*\left(z,r\right)&=\frac{U_R}{I_0\left(\pi R/2L\right)}\left[z\sin\left(\frac{\pi z}{2L}\right)I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right)-r\cos\left(\frac{\pi z}{2L}\right)I_1\left(\frac{\pi r}{2L}\right)\right]. \end{aligned} \qquad (14)$$

В этом случае на графике псевдопотенциала тоже возникает желоб, который эффективно «прижимает» ионы к оси устройства, причем сила такого воздействия квадратично возрастает по мере приближении к выходу из воронки. А вот гофрировки псевдопотенциала вдоль оси нет, что гарантирует отсутствие локальных паразитных ловушек для ионов вдоль оси их перемещения. Однако значение псевдопотенциала на оси все же не нулевое, а значит формируется высокочастотное электрическое поле, которое раскачивает ионы. Следовательно, в такой конструкции также не приходится надеяться на охлаждение ионов (сброс их избыточной кинетической энергии). Кроме того, распределение псевдопотенциальной функции по оси воронки медленно растет при увеличении расстояния от нуля по координате *z*, что несколько тормозит движение ионов и препятствует их прохождению через выходное отверстие, аналогично предыдущему случаю.

Помимо описанных особенностей модели, в случае высокочастотного электрического поля вида (13), имеется пространственный градиент его фазы. Но он играет позитивную роль, так как возникающая при этом непотенциальная электрическая псевдосила лишь дополнительно прижимает ионы к оси устройства и обеспечивает постоянное тянущее усилие, направленное к выходу из воронки. Этот фактор мог бы позволить обойтись без дополнительного тянущего статического электрического поля, однако тянущая электрическая псевдосила зависит от массы и, следовательно, возможно новое препятствие – дополнительная дискриминация по массам ионов. Может возникнуть ситуация, когда для слишком больших значений массы тянущее усилие псевдосилы окажется неспособным преодолеть торможение движущихся ионов и возникнет препятствие для их выхода из воронки.

Анализ свойств конической воронки с архимедовой волной псевдопотенциала

Системы с бегущей волной псевдопотенциала рассматриваются в работах [19 – 21]. В данном случае исследуются свойства радиочастотной ловушки с коническими электродами, у которой высокочастотное электрическое поле формирует вдоль оси устройства медленно бегущую волну псевдопотенциала. В минимумах волны псевдопотенциала высокочастотное электрическое поле равно нулю, и именно в этих точках формируются локальные сгустки ионов, которые затем перемещаются вдоль оси устройства на выход из воронки, причем синхронно с перемещением локальных минимумов псевдопотенциальной волны. Существенно, что таким образом обеспечивается транспортировка ионов, не зависящая от их массы, поскольку скорость перемещения минимумов волны псевдопотенциала определяется параметрами высокочастотных напряжений, приложенных к электродам устройства (и ничем иным).

Для такой радиочастотной ловушки электрический потенциал вблизи оси описывается с хорошей точностью следующей формулой:

$$V\left(z,r,t\right)=\left[V_C^*\left(z,r\right)\cos\left(2\pi t/T\right)+V_S^*\left(z,r\right)\sin\left(2\pi t/T\right)\right]\cos\left(\omega t+\varphi\right), \qquad (15)$$

где T — период «медленного» времени, определяющий скорость транспортировки; потенциалы $V_C^*\left(z,r\right)$ и $V_S^*\left(z,r\right)$ задаются формулами (14).

В этом случае график также показывает гофрированный желоб псевдопотенциала, а по мере развития процесса во времени гофрировка медленно перемещается вместе с транспортирующей волной псевдопотенциала, эффективно прижимая ионы к оси устройства. Кроме того, на оси системы возникает медленно бегущая волна псевдопотенциала, принудительно транспортирующая ионы от входа к выходу.

Бегущая волна псевдопотенциала на оси радиочастотной воронки характеризуется переменной максимальной амплитудой, которая квадратично растет по мере приближения к выходу из воронки, но при этом в точках минимума значение псевдопотенциала бегущей волны равно нулю. Как уже отмечалось выше, в точках минимума происходит захват ионов и формирование их сгустков, а при медленном перемещении волны псевдопотенциала вдоль оси устройства осуществляется синхронизированная транспортировка ионов, не зависящая от их массы. Поскольку в центрах сгустков ионов высокочастотное электрическое поле равно точно нулю, а при незначительных отклонениях ионов в пределах объема сгустка высокочастотное электрическое поле оказывается очень малым, вполне можно рассчитывать хотя бы на частичное охлаждение ионов в процессе транспорта через форвакуумную область газодинамического интерфейса.

Пространственный градиент фазы высокочастотного электрического поля для электрического потенциала (15) равен нулю, поэтому какие-либо дополнительные эффекты, связанные с наличием непотенциальной псевдоэлектрической силы (см. формулы (9) — (11)), в такой системе отсутствуют.

Заключение

Для радиочастотных ионных воронок с круговыми диафрагмами были построены аналитические модели высокочастотного электрического поля. С их помощью был выполнен качественный анализ функционирования радиочастотных ионных воронок в разных режимах работы. В результате из всех рассмотренных вариантов наиболее перспективной конструкцией представляется радиочастотная воронка с коническим каналом транспортировки и электрическим питанием, обеспечивающим формирование транспортирующей архимедовой волны псевдопотенциала на оси устройства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ketola R. A., Kiuru J. T., Tarkiainen V., Kotiaho T., Sysoev A. A.** Comparison of analytical performance of a micro array quadrupole instrument and a conventional quadrupole mass spectrometer equipped with membrane inlets // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2003. Vol. 17. No. 7. Pp. 753—756.

2. **Adamov A., Viidanoja J., Kärpänoja E., Paakkanen H., Ketola R. A., Kostiainen R., Sysoev A., Kotiaho T.** Interfacing an aspiration ion mobility spectrometer to a triple quadrupole mass spectrometer // Review of Scientific Instruments. 2007. Vol. 78. No. 4. P. 044101.

3. **Troyan V. I., Borisyuk P. V., Krasavin A. V., Vasiliev O. S., Palchikov V. G., Avdeev I. A., Chernyshev D. M., Poteshin S. S., Sysoev A. A.** Multisectional linear ion trap and novel loading method for optical spectroscopy of electron and nuclear transitions // European Journal of Mass Spectrometry. 2015. Vol. 21. No. 1. Pp. 1—12.

4. **Борисюк П. В., Васильев О. С., Деревяшкин С. П. и др.** Захват, удержание и лазерное охлаждение ионов Th^{3+} в многосекционной линейной квадрупольной ловушке // Квантовая электроника. 2017. Т. 47. № 5. С. 406—411.

5. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.** Loading of mass spectrometry ion trap with Th ions by laser ablation for nuclear frequency standard application // European Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 23. No. 4. Pp. 146–151.

6. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.** Mass selective laser cooling of $^{229}Th^{3+}$ in a multisectional linear Paul trap loaded with a mixture of thorium isotopes // European Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 23. No. 4. Pp. 136–139.

7. **Konenkov A. N., Konenkov N. V., Sysoev A. A.** Modeling dipolar excitation for quadrupole mass filter // European Journal of Mass Spectrometry. 2022. Vol. 28. No. 1–2. Pp. 65–72.

8. **Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.** Balance of the 6th and 10th spatial harmonics amplitudes of a quadrupole mass filter with round rods // International Journal of Mass Spectrometry. 2022. Vol. 482. December. P. 116949.

9. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.** Properties of the multipole fields formed by round electrodes // International Journal of Mass Spectrometry. 2023. Vol. 490. August. P. 117081.

10. **Бугров П. В., Сысоев А. А., Коненков Н. В.** Моделирование квадрупольного фильтра масс с октупольным полем // Масс-спектрометрия 2022. Т. 19. № 3. С. 197–200.

11. **Yavor M. I.** Optics of charged particle analyzers. Amsterdam: Academic Press, 2009 (Advances of Imaging and Electron Physics. Vol. 157). Pp. 142–168.

12. **Teloy E., Gerlich D.** Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique // Chemical Physics. 1974. Vol. 4. No. 3. Pp. 417–427.

13. **Gerlich D., Kaefer G.** Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with n-H_2, p-H_2, D_2 and He at 80 K // The Astrophysical Journal. 1989. Vol. 347. No. 2. Pp. 849–854.

14. **Абрамовиц М., Стиган И.** Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.

15. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing; URL: http://wolfram.com/mathematica/

16. **Berdnikov A. S.** A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. S4. Pp. 78–83.

17. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е.** М. Курс теоретической физики. В 10 тт. Т. 10. Физическая кинетика (**Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.**). М.: Физматлит, 2007. 536 с.

18. **Tolmachev A. V., Chernushevich I. V., Dodonov A. F., Standing K. G.** A collisional focusing ion guide for coupling an atmospheric pressure ion source to a mass spectrometer // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 1997. Vol. 124. No. 1. Pp. 112–119.

19. **Андреева А. Д., Бердников А. С.** Масс-спектрометрические устройства на основе радиочастотных электрических полей с архимедовыми свойствами // Масс-спектрометрия. 2011. Т. 8. № 4. С. 293–296.

20. **Бердников А. С., Андреева А. Д.** Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2011. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на полезную модель RU 113611 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011).

21. **Бердников А. С., Андреева А. Д.** Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2012. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на изобретение RU 2465679 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011).

REFERENCES

1. **Ketola R. A., Kiuru J. T., Tarkiainen V., et al.,** Comparison of analytical performance of a micro array quadrupole instrument and a conventional quadrupole mass spectrometer equipped with membrane inlets, Rapid Commun. Mass Spectrom. 17 (7) (2003) 753–756.

2. **Adamov A., Viidanoja J., Kärpänoja E., et al.,** Interfacing an aspiration ion mobility spectrometer to a triple quadrupole mass spectrometer, Rev. Sci. Instrum. 78 (4) (2007) 044101.

3. **Troyan V. I., Borisyuk P. V., Krasavin A. V., et al.,** Multisectional linear ion trap and novel loading method for optical spectroscopy of electron and nuclear transitions, Eur. J. Mass Spectrom. 21 (1) (2015) 1–12.

4. **Borisyuk P. V., Vasiliev O. S., Derevyashkin S. P., et al.,** Trapping, retention and laser cooling of Th^{3+} ions in a multisection linear quadrupole trap, Quant. Electron. 47 (5) (2017) 406–411.

5. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.,** Loading of mass spectrometry ion trap with Th ions by laser ablation for nuclear frequency standard application, Eur. J. Mass Spectrom. 23 (4) (2017) 146–151.

6. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.,** Mass selective laser cooling of $^{229}Th^{3+}$ in a multisectional linear Paul trap loaded with a mixture of thorium isotopes, Eur. J. Mass Spectrom. 23 (4) (2017) 136–139.

7. **Konenkov A. N., Konenkov N. V., Sysoev A. A.,** Modeling dipolar excitation for quadrupole mass filter, Eur. J. Mass Spectrom. 28 (1–2) (2022) 65–72.

8. **Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.,** Balance of the 6th and 10th spatial harmonics amplitudes of a quadrupole mass filter with round rods, Int. J. Mass Spectrom. 482 (December) (2022) 116949.

9. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.,** Properties of the multipole fields formed by round electrodes, Int. J. Mass Spectrom. 490 (August) (2023) 117081.

10. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov N. V.,** Modeling of a quadrupole mass filter with octupole field, Mass-Spektrometriya. 19 (3) (2022) 197–200 (in Russian).

11. **Yavor M. I.,** Optics of charged particle analyzers (Advances of Imaging and Electron Physics. Vol. 157), Academic Press, Amsterdam (2009) 142–168.

12. **Teloy E., Gerlich D.,** Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique, Chem. Phys. 4 (3) (1974) 417–427.

13. **Gerlich D., Kaefer G.,** Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with n-H_2, p-H_2, D_2 and He at 80 K, Astrophys. J. 347 (2) (1989) 849–854.

14. **Abramowitz M. A., Stegun I. A. (Eds.),** Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, Tenth edition, National Bureau of Standards, Washington, 1972.

15. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing, URL: http://wolfram.com/mathematica/

16. **Berdnikov A. S.,** A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields, Microsc. Microanal. 21 (S4) (2015) 78–83.

17. **Landau L. D., Lifshitz E. M.,** Course of theoretical physics. Vol. 10. **Pitayevskii L. P, Lifshitz E. M.,** Physical kinetics, First edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, UK. 1981.

18. **Tolmachev A. V., Chernushevich I. V., Dodonov A. F., Standing K. G.,** A collisional focusing ion guide for coupling an atmospheric pressure ion source to a mass spectrometer, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 124 (1) (1997) 112–119.

19. **Andreeva A. D., Berdnikov A. S.,** Mass spectrometric devices with Archimedean radio frequency electric fields, J. Anal. Chem. 67 (13) (2012) 1034–1037.

20. **Berdnikov A. S., Andreeeva A. D.,** Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami, patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na poleznuyu model RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for a utility model of the Russian Federation] – RU 113611 (05.05.2011) (in Russian).

21. **Berdnikov A. S., Andreeeva A. D.,** Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami, patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na izobreteniye RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for an invention of the Russian Federation] – RU 2465679 (2012) (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЫСОЕВ Алексей Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Национального исследовательского ядерного университета МИФИ, Москва, Россия.*

115409, Россия, г. Москва, Каширское шоссе, 31
aasysoyev@mephi.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.
asberd@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович – *старший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.
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, младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия. Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
k-solovyev@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3514-8577

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

THE AUTHORS

SYSOEV Alexey A.
National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute)
31 Kashirskoe HWY, Moscow, 115409, Russia
aasysoyev@mephi.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

BERDNIKOV Alexander S.
Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
asberd@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

MASYUKEVICH Sergey V.
Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
serg_08@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0873-8849

SOLOVYEV Konstantin V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Institute for Analytical Instrumentation, RAS
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
k-solovyev@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3514-8577

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

Статья поступила в редакцию 25.09.2023. Одобрена после рецензирования 16.10.2023. Принята 16.10.2023.

Received 25.09.2023. Approved after reviewing 16.10.2023. Accepted 16.10.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Физическое материаловедение

Научная статья
УДК 539.21
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16412

СРАВНЕНИЕ ПОДХОДОВ К УЧЕТУ НЕИДЕАЛЬНЫХ КОНТАКТОВ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ЭФФЕКТИВНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ МАТЕРИАЛА

К. П. Фролова ✉, **Е. Н. Вильчевская**

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ fkp@ipme.ru

Аннотация. В работе развивается комплексный подход к учету неидеальных контактов (НК), появление которых вызвано разнообразными факторами (особенности микроструктуры, специфика процесса на мезоуровне и т. п.), при определении эффективных свойств материала различной природы, представляемых тензорами второго ранга. Макроскопические свойства определяются путем решения задачи гомогенизации для материала, состоящего из матрицы и изолированных эллипсоидальных неоднородностей, на границе которых поля не являются непрерывными. Рассмотрены, обобщены и сопоставлены существующие подходы к учету НК: подход, при котором НК моделируют, вводя скачок поля на границе раздела фаз через задаваемое отношение значений поля по обе стороны границы, а также подход, при котором в рассмотрение вводится неоднородность с поверхностным эффектом. С целью учета НК при нахождении эффективных свойств материала, рассматривается эквивалентная неоднородность с идеальными контактами на границе, вклад которой в макроскопическое свойство эквивалентен вкладу исходной неоднородности. В качестве примера решена задача об определении эффективной диффузионной проницаемости материала.

Ключевые слова: эффективные свойства, неидеальный контакт, эквивалентная неоднородность, эффективная диффузионная проницаемость, задача гомогенизации

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-79-01133 (https://rscf.ru/project/23-79-01133/).

Для цитирования: Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. Сравнение подходов к учету неидеальных контактов при определении эффективной проницаемости материала // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 146–159. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16412

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16412

COMPARISON OF APPROACHES TO ACCOUNTING FOR IMPERFECT CONTACTS WHEN DETERMINING THE EFFECTIVE PERMEABILITY OF MATERIAL

K. P. Frolova ✉, **E. N. Vilchevskaya**

Institute for Problems of Mechanical Engineering, RAS, St. Petersburg, Russia

✉ fkp@ipme.ru

Abstract. The paper develops a complex approach to accounting for imperfect contacts (IC) when determining effective properties of various nature. The IC are assumed to be caused by various factors (microstructure features, process's specifity and so on). To obtain macroscopic properties, we seek a solution of the homogenization problem for the material containing isolated ellipsoidal inhomogeneities when fields are discontinuous at the interphase boundaries. The paper considers, generalizes and compares two existing approaches to accounting for the IC, namely, an approach where IC is modeled by means of a field jump specified in terms of a ratio of field values on the outer and inner sides of the inhomogeneity boundary, and approach, which introduces inhomogeneity with a surface effect. To take into account IC, we have considered an equivalent inhomogeneity with ideal contacts at the boundary. Working the problem on determining the effective diffusional permeability of material provided an example.

Keywords: effective properties, imperfect contact, equivalent inhomogeneity, effective diffusional permeability, homogenization problem

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation, Grant No. 23-79-01133 (https://rscf.ru/project/23-79-01133/).

For citation: Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Comparison of approaches to accounting for imperfect contacts when determining the effective permeability of material, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 146–159. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16412

Введение

Свойства материала, неоднородного на микроуровне, непосредственно зависят от его структуры и могут быть определены в рамках континуальной теории с помощью методов гомогенизации. При этом в рассмотрение вводятся физические поля, которые, как правило, полагаются непрерывными на границах раздела фаз. С физической точки зрения это означает наличие «идеальных» контактов на внутренних границах. В то же время, при описании ряда явлений необходимо учитывать наличие неидеальных контактов, которые могут возникать как из-за особенностей микроструктуры материала, так и в связи со спецификой описываемого процесса [1 – 4].

Как правило, вопросы учета неидеальных контактов при определении эффективных свойств рассматриваются в литературе обособленно, в контексте описания процессов, разных по природе. Так, некоторые авторы обратили внимание на необходимость учета явления сегрегации при определении эффективных коэффициентов диффузии. Под этим явлением подразумевается оседание примеси в дефектах структуры, характерное для массопереноса [2, 5 – 8]. Такой учет реализовывался посредством введения скачка концентрации через отношение концентраций с внешней и внутренней сторон границы раздела фаз (параметр сегрегации). С применением этого подхода авторы статьи [2] получили границы Фойгта – Рейсса и Хашина – Штрикмана для эффективной подвижности примеси, выразив диффузионный поток через градиент химического потенциала (потенциал полагали непрерывным), после чего определили непосредственно эффективные коэффициенты диффузии. В статьях [5, 6] постоянный параметр сегрегации был введен в уравнения модифицированного метода эффективной среды. В работах [7, 8] указанный параметр был введен в уравнения методов эффективного поля.

Отдельно в литературе рассматривались подходы к учету неидеальных контактов при определении эффективной тепло- или электропроводности микрогетерогенного материала [9 – 12]. Полагали, что такие контакты появляются вследствие наличия поверхностных дефектов (шероховатости, отслоения и т. п.). Моделирование неидеальных контактов осуществлялось через рассмотрение неоднородностей с поверхностным эффектом (предполагали, что такие неоднородности покрыты слоем с экстремальными свойствами, толщина которого стремится к нулю). Поверхностный эффект учитывали, либо определяя величины скачка поля из решения задачи об изолированной неоднородности в бесконечной матрице [9], либо аппроксимируя выражения для тензоров концентрации, связывающих средние поля внутри неоднородности с приложенным полем [10 – 12].

Подобие уравнений диффузии, тепло- и электропроводности позволяет сделать предположение о возможности разработки единого подхода к моделированию неидеальных контактов, вызванных разнообразными факторами, при определении для материала эффективных свойств различной природы. В статье [13] мы обобщили подходы, представленные в литературе, и провели их сравнение на примере нахождения эффективного коэффициента диффузии примеси в материале со сферическими неоднородностями.

Целью настоящей работы является дальнейшее обобщение и сравнение имеющихся подходов для случаев материала со сфероидальными и эллипсоидальными неоднородностями.

Постановка задачи гомогенизации

Эффективные свойства материала находятся через решение задачи гомогенизации для репрезентативного объема V, представляющего собой частицу сплошной среды на макроуровне. Эффективные свойства выражаются с помощью тензорных величин, связывающих между собой поля, средние по репрезентативному объему. Как правило, предполагают, что гомогенизированный материал удовлетворяет простейшим линейным определяющим соотношениям. В силу подобия уравнений диффузии, тепло- и электропроводности ограничимся далее рассмотрением задачи диффузии, для которой справедлив закон Фика:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}^{eff} \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_V , \tag{1}$$

где $\mathbf{D}^{eff}$ – эффективный тензор диффузионной проницаемости (тензор диффузии примеси в гомогенизированном материале), $\mathbf{J}$ – диффузионный поток, c – концентрация, ∇ – набла-оператор, $\left\langle ... \right\rangle_V = \left(1/V\right)\int_V \left(...\right)\, dV$.

Для нахождения полей, подлежащих осреднению, решается стационарная задача диффузии. Закон сохранения в отсутствие внутренних источников/стоков имеет следующий вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}\left(\mathbf{x}\right) = 0, \tag{2}$$

где $\mathbf{x}$ – радиус-вектор точки внутри объема V.

Поток и градиент концентрации в каждой точке репрезентативного объема связываются линейным определяющим соотношением:

$$\mathbf{J}\left(\mathbf{x}\right) = -\mathbf{D}\left(\mathbf{x}\right) \cdot \nabla c\left(\mathbf{x}\right), \tag{3}$$

где $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ – тензор диффузионной проницаемости материала в точке $\mathbf{x}$.

Независимость эффективных свойств от условий на границе Σ репрезентативного объема допускает произвольность их выбора. Удобно задавать однородное условие Хилла, которое в случае задачи диффузии имеет вид $c\left(\mathbf{x}\right)\Big|_\Sigma = \mathbf{G}_0 \cdot \mathbf{x}$. Тогда среднее значение градиента концентрации полностью определяется граничным условием [14]:

$$\left\langle \nabla c \right\rangle_V = \mathbf{G}_0. \tag{4}$$

Наличие границ внутри объема V (границ Γ раздела фаз) требует задания дополнительных граничных условий. Эти условия будут разными в зависимости от способа учета неидеальных контактов.

Рассмотрим далее материал, состоящий из изотропной матрицы, характеризующейся тензором диффузионной проницаемости $\mathbf{D}_0 = D_0\mathbf{I}$ ($\mathbf{I}$ – единичный тензор), и неоднородностей эллипсоидальной формы объемом V_1 с проницаемостью $\mathbf{D}_1 = D_1\mathbf{I}$, и приведем условия на границах раздела фаз.

Одним из простейших, известных из литературы способов учета неидеального контакта является введение скачка поля на границе раздела матрица (+) / неоднородность (–) через постоянное отношение значений поля с внешней и внутренней сторон границы. В контексте задачи диффузии скачок может испытывать либо поле концентрации, либо нормальная компонента потока. В первом случае на границе раздела фаз Γ с внешней нормалью $\mathbf{n}_\Gamma$ справедливы следующие условия:

$$D_0 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma+} = D_1 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}, \quad c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma+} = s_c\, c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}, \tag{5}$$

где s_c – параметр сегрегации.

Скачок выражается как $[c] = (s_c - 1)c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}$.

При наличии скачка нормальной компоненты потока J_n, можно задать следующие условия, введя в рассмотрение параметр сегрегации s_f:

$$D_0 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma+} = s_f\, D_1 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}, \quad c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma+} = c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}. \tag{6}$$

Скачок в этом случае определяется как $[J_n] = (s_f - 1)\mathbf{n}_\Gamma \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}$.

Другой способ учета неидеального контакта используется при рассмотрении неоднородностей с поверхностным эффектом. В общем случае в матрицу помещают неоднородности, представляющие собой конфокальные эллипсоиды, для которых проводимость внутреннего эллипсоида $\mathbf{D}_1 = D_1\mathbf{I}$, а проводимость внешнего слоя $\mathbf{D}_s = D_s\mathbf{I}$.

Главные полуоси внешнего эллипсоида b_1, b_2, b_3 и внутреннего эллипсоида a_1, a_2, a_3 связаны следующим соотношением:

$$b_i^2 = a_i^2 + \xi,$$

где $i = 1, 2, 3$; ξ – константа.

На внутренних границах Γ_a внутреннего эллипсоида объемом V_a с внешней нормалью $\mathbf{n}_{\Gamma_a}$ и Γ_b внешнего эллипсоида объемом V_b с внешней нормалью $\mathbf{n}_{\Gamma_b}$ имеют место идеальные контакты:

$$\begin{gathered} D_0 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_b}}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma_b+} = D_s \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_b}}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma_b-}, \quad c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma_b+} = c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma_b-}, \\ D_s \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_a}}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma_a+} = D_1 \left.\frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_a}}\right|_{\mathbf{x}\to\Gamma_a-}, \quad c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma_a+} = c(\mathbf{x})\big|_{\mathbf{x}\to\Gamma_a-}. \end{gathered} \tag{7}$$

Для учета поверхностного эффекта необходимо перейти к пределу при $\xi \to 0$, а также (в контексте задачи диффузии) либо при $D_s \to 0$, либо при $D_s \to \infty$. В первом случае, соответствующем изолирующему покрытию, в рассмотрение удобно ввести эквивалентную поверхностную сопротивляемость

$$\beta = \frac{V_s}{D_s S_a} = \frac{4\pi\left(a_1^2 a_2^2 + a_1^2 a_3^2 + a_2^2 a_3^2\right)}{6a_1 a_2 a_3 S_a} \lim_{\xi\to 0, D_s\to 0} \frac{\xi}{D_s}, \tag{8}$$

где $V_s = \lim_{\xi\to 0} V_b - V_a$, S_a – площадь поверхности неоднородности объемом V_a.

Во втором случае, соответствующем проводящему покрытию, удобно ввести эквивалентную поверхностную проницаемость

$$\lambda = \frac{D_s V_s}{S_a} = \frac{4\pi\left(a_1^2 a_2^2 + a_1^2 a_3^2 + a_2^2 a_3^2\right)}{6a_1 a_2 a_3 S_a} \lim_{\xi\to 0, D_s\to\infty} \xi D_s. \tag{9}$$

Неоднородность с неидеальными контактами можно формально заменить эквивалентной неоднородностью с идеальными контактами, влияющей на эффективные свойства так же, как и исходная. Для осуществления такой замены необходимо определить, какими свойствами $\mathbf{D}^*$ должна обладать эквивалентная неоднородность. Эти свойства будут разными в зависимости от способа учета неидеального контакта.

Введение в рассмотрение эквивалентной неоднородности обладает тем преимуществом, что появляется возможность использовать существующие методы гомогенизации, разработанные в предположении о непрерывности полей на реальной границе раздела фаз. В этом случае достаточно подставить соответствующие коэффициенты диффузии примеси внутри неоднородности в выражения, известные из литературы. Поскольку, таким образом, наличие неидеальных контактов достаточно учесть на этапе определения диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, ограничимся в рамках данной работы качественным и количественным анализами выражений для $\mathbf{D}^*$.

Отметим, что неидеальный контакт, моделируемый через задание скачка концентрации либо посредством рассмотрения неоднородности с *изолирующим* покрытием, может иметь место при скоплении примеси на границе раздела фаз. Неидеальный же контакт, который моделируется через задание другого скачка, а именно – нормальной компоненты протока, либо посредством рассмотрения неоднородности с *проводящим* покрытием, может существовать при образовании дополнительных путей диффузии по границе раздела фаз.

В связи с этим для каждого из указанных случаев представляет интерес сравнить между собой два подхода к моделированию неидеальных контактов:

посредством задания скачка поля через параметр сегрегации;

через рассмотрение неоднородности с поверхностным эффектом.

Эффективное свойство можно выразить как функцию различных микроструктурных параметров. В настоящей статье использован подход, разработанный И. Севостьяновым и М. Качановым [14], согласно которому роль микроструктурного параметра играет сумма тензоров вклада неоднородностей. Приведем далее выражения для этих тензоров при наличии в материале неидеальных контактов, моделируемых с помощью рассмотренных выше подходов.

Тензоры вклада

При определении тензоров вклада неоднородности считаются изолированными. Если на границе репрезентативного объема задана концентрация, то средний по репрезентативному объему градиент c полностью определен, тогда как средний поток зависит от микроструктуры; его можно представить в виде суммы

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 + \Delta\mathbf{J}, \tag{10}$$

где $\Delta\mathbf{J}$ – дополнительный поток, вызванный присутствием неоднородности.

Такой дополнительный поток есть линейная функция от приложенного поля [13]:

$$\Delta\mathbf{J} = -\frac{V_1}{V}\mathbf{H}^D \cdot \mathbf{G}_0, \tag{11}$$

где $\mathbf{H}^D$ – тензор вклада неоднородности в диффузионную проницаемость.

Тензор вклада можно найти через решение задачи Эшелби для диффузии. Последняя имеет аналитическое решение только для эллипсоидальной неоднородности. В этом случае тензор вклада можно выразить через тензор концентрации, линейно связывающий поле внутри неоднородности с приложенным полем.

Таким образом, для нахождения тензора вклада необходимо решить задачу об осреднении полей и найти тензор концентрации. При этом наличие неидеальных контактов следует учитывать на обоих этапах.

Далее будет представлено краткое описание обоих этапов.

Осреднение полей

Определим средние поля в случае идеальных контактов на границе раздела матрица/неоднородность, что в рамках данной работы соответствует материалу с эквивалентной неоднородностью, а также при моделировании неидеальных контактов различными способами.

Согласно теореме Остроградского – Гаусса,

$$\langle \nabla c\rangle_V = \frac{1}{V}\int_\Sigma \mathbf{n}_\Sigma c(\mathbf{x})\,d\Sigma,\quad \langle \mathbf{J}\rangle_V = \frac{1}{V}\int_\Sigma \mathbf{n}_\Sigma \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x})\,\mathbf{x}\,d\Sigma, \tag{12}$$

где $\mathbf{n}_\Sigma$ – внешняя нормаль к поверхности Σ репрезентативного объема V.

Выражения (12) удобно переписать с учетом границ раздела фаз; при этом следует добавить и вычесть соответствующие поверхностные интегралы. Тогда при идеальных контактах на границе неоднородности объемом V_1 получим известные формулы:

$$\langle \nabla c\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \nabla c\rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V}\langle \nabla c\rangle_{V_1},\quad \langle \mathbf{J}\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \mathbf{J}\rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V}\langle \mathbf{J}\rangle_{V_1}, \tag{13}$$

где $\langle \ldots\rangle_{V_0} = (1/V_0)\int_{V_0}(\ldots)\,dV_0$, $\langle \ldots\rangle_{V_1} = (1/V)_1\int_{V_1}(\ldots)\,dV_1$.

Случай материала с неоднородностью с покрытием конечной толщины, которое характеризуется конечными свойствами, является частным случаем трехфазного материала, на внутренних границах которого имеются идеальные контакты.

Средние поля в таком случае следуют выражениям

$$\begin{gathered}\langle \nabla c\rangle_V = \left(1-\frac{V_b}{V}\right)\langle \nabla c\rangle_{V_0} + \frac{V_a}{V}\langle \nabla c\rangle_{V_a} + \frac{V_s}{V}\langle \nabla c\rangle_{V_s},\\ \langle \mathbf{J}\rangle_V = \left(1-\frac{V_b}{V}\right)\langle \mathbf{J}\rangle_{V_0} + \frac{V_a}{V}\langle \mathbf{J}\rangle_{V_a} + \frac{V_s}{V}\langle \mathbf{J}\rangle_{V_s},\end{gathered} \tag{14}$$

где $\langle \ldots\rangle_{V_a} = (1/V_a)\int_{V_a}(\ldots)\,dV_a$ и $\langle \ldots\rangle_{V_s} = (1/V_s)\int_{V_s}(\ldots)\,dV_s$.

При наличии скачка концентрации на границе раздела фаз, средний градиент концентрации должен определяться следующим образом [6]:

$$\langle \nabla c\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \nabla c\rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V}\langle \nabla c\rangle_{V_1} + \frac{1}{V}\int_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma [c]\,d\Gamma, \tag{15}$$

тогда как средний поток вычисляется по формуле (13).

Если задавать скачок концентрации через параметр сегрегации при условии (5), то формулу (15) удобно переписать в следующем виде:

$$\langle \nabla c\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \nabla c\rangle_{V_0} + s_c\frac{V_1}{V}\langle \nabla c\rangle_{V_1}. \tag{16}$$

Наличие скачка нормальной компоненты потока приводит к необходимости использования следующей формулы для среднего потока [6]:

$$\langle \mathbf{J}\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \mathbf{J}\rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V}\langle \mathbf{J}\rangle_{V_1} + \frac{1}{V}\int_\Gamma [J_n]\,\mathbf{x}\,d\Gamma, \tag{17}$$

при этом средний градиент концентрации определяется по формуле (13).

В частном случае, когда скачок нормальной компоненты потока задан в соответствии с условием (6), средний поток определяется выражением

$$\langle \mathbf{J}\rangle_V = \left(1-\frac{V_1}{V}\right)\langle \mathbf{J}\rangle_{V_0} + s_f\frac{V_1}{V}\langle \mathbf{J}\rangle_{V_1}. \tag{18}$$

Выражая $\langle \nabla c\rangle_{V_0}$ через $\mathbf{G}_0$, получим следующие представления для среднего потока:

для материала с эквивалентной неоднородностью –

$$\langle \mathbf{J}\rangle_V = -\mathbf{D}_0\cdot\mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V}\left(\mathbf{D}^* - \mathbf{D}_0\right)\cdot\langle \nabla c\rangle_{V_1}, \tag{19}$$

для материала с неоднородностью и покрытием конечной толщины (характеризующегося конечными свойствами) –

$$\langle \mathbf{J}\rangle = -\mathbf{D}_0\cdot\mathbf{G}_0 - \frac{V_a}{V}\left(\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_0\right)\cdot\langle \nabla c\rangle_{V_a} - \frac{V_s}{V}\left(\mathbf{D}_s - \mathbf{D}_0\right)\cdot\langle \nabla c\rangle_{V_s}. \tag{20}$$

Для материала с неоднородностью, на границе которой имеет место скачок поля, определяемый параметром сегрегации, справедливы следующие представления:

при наличии скачка концентрации –

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V}\left(\mathbf{D}_1 - s_c \mathbf{D}_0\right) \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{V_1}, \tag{21}$$

при наличии скачка нормальной компоненты потока –

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V}\left(s_f \mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_0\right) \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{V_1}. \tag{22}$$

Представление тензоров вклада через тензоры концентрации

Средние градиенты концентрации, входящие в выражения (19) – (22), можно выразить для случая эллипсоидальной неоднородности через приложенное поле $\mathbf{G}_0$, для чего ввести тензоры концентрации $\mathbf{\Lambda}_*$, $\mathbf{\Lambda}_a$, $\mathbf{\Lambda}_s$, $\mathbf{\Lambda}$с, $\mathbf{\Lambda}_f$, удовлетворяющие равенствам

$\left\langle \nabla c \right\rangle_{V_1} = \mathbf{\Lambda}_* \cdot \mathbf{G}_0$ (для эквивалентной неоднородности),

$\left\langle \nabla c \right\rangle_{V_a} = \mathbf{\Lambda}_a \cdot \mathbf{G}_0$ и $\left\langle \nabla c \right\rangle_{V_s} = \mathbf{\Lambda}_s \cdot \mathbf{G}_0$ (для неоднородности с покрытием),

$\left\langle \nabla c \right\rangle_{V_1} = \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{G}_0$ (для неоднородности, на границе которой имеет место скачок концентрации, определяемый через параметр сегрегации),

$\left\langle \nabla c \right\rangle_{V_1} = \mathbf{\Lambda}_f \cdot \mathbf{G}_0$ (для неоднородности, на границе которой имеет место скачок нормальной компоненты потока, определяемый через параметр сегрегации).

Выражения для этих тензоров концентрации были получены в работах [8, 10 – 14]. Принимая их во внимание и учитывая формулы (10), (11), ограничимся здесь приведением окончательных выражений для тензоров вклада неоднородностей:

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^{3} \frac{D_{ii}^* - D_0}{D_{ii}^* A_i + D_0\left(1 - A_i\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i. \tag{23}$$

(для эквивалентной неоднородности с идеальными контактами [14]);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^{3} \frac{D_1 - D_0 - D_0 D_1 \beta \frac{S_a}{V_a} A_i}{A_i D_1 + \left(1 - A_i\right) D_0 + \left(1 - A_i\right) D_0 D_1 \beta \frac{S_a}{V_a}\left(A_i - \frac{F_i}{H}\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \tag{24}$$

(для неоднородности с изолирующим покрытием);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^{3} \frac{D_1 - D_0 + \lambda \frac{S_a}{V_a}\left(1 - A_i\right)}{A_i D_1 + \left(1 - A_i\right) D_0 + A_i \lambda \frac{S_a}{V_a}\left(1 - A_i + \frac{F_i}{H}\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \tag{25}$$

(для неоднородности с проводящим покрытием);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^{3} \frac{D_1 - s_c D_0}{A_i D_1 + s_c D_0\left(1 - A_i\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \tag{26}$$

(при наличии скачка концентрации, определяемого через параметр сегрегации s_c [8]),

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^{3} \frac{s_f D_1 - D_0}{A_i s_f D_1 + D_0\left(1 - A_i\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \tag{27}$$

(при наличии скачка нормальной компоненты потока, определяемого через параметр сегрегации s_f [13]).

В случае сфероидальной неоднородности, при $a_1 = a_2 = a$, $\gamma = a_3/a$ справедливы следующие равенства:

$$A_1 = A_2 = f_0(\gamma),\ A_3 = 1 - 2f_0(\gamma),$$

$$F_1 = F_2 = \frac{1}{a^2}\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{\gamma^2}f_0(\gamma) - \left[1 - 2f_0(\gamma)\right]\right\},$$

$$F_3 = -\frac{1}{a^2}\left\{\frac{1}{\gamma^2}f_0(\gamma) - \left[1 - 2f_0(\gamma)\right]\right\},$$

где

$$f_0(\gamma) = \frac{1 - g(\gamma)}{2\left(1 - \gamma^{-2}\right)},\ g = g(\gamma) = \begin{cases} \dfrac{1}{\gamma\sqrt{1-\gamma^2}}\arctan\dfrac{\sqrt{1-\gamma^2}}{\gamma}, & \gamma \le 1; \\ \dfrac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}}\ln\left(\dfrac{\gamma + \sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma - \sqrt{\gamma^2-1}}\right), & \gamma \ge 1. \end{cases}$$

В случае сферической неоднородности $F_1 = F_2 = F_3 = 0, f_0(\gamma) = 1/3$.

Отметим, что согласно выводам, представленным в монографии [9], где рассматривались только сферические неоднородности, наличие изолирующего покрытия приводит к появлению скачка концентрации на границе раздела матрица/неоднородность, а наличие проводящего слоя – к появлению скачка нормальной компоненты потока, которые определяются через решение задачи для составной неоднородности при предельном переходе. Это соответствует физическим представлениям о моделируемом явлении, что было отмечено выше.

Для корректной реализации процедуры сравнения двух подходов к моделированию неидеального контакта (через задание скачка поля через соответствующий параметр сегрегации и посредством рассмотрения неоднородности с соответствующим типом поверхностного эффекта) определим далее, какой диффузионной проницаемостью $\mathbf{D}^*$ должна обладать эквивалентная неоднородность, вклад которой в макроскопическое свойство совпадает с вкладом неоднородности с неидеальным контактом, моделируемым в рамках разных подходов.

Эквивалентная неоднородность

Начнем с рассмотрения неидеального контакта, когда имеет место оседание примеси на границе раздела матрица/неоднородность. При моделировании такого контакта путем задания скачка концентрации через параметр сегрегации, из равенства тензора вклада, определяемого выражением (26), и тензора вклада эквивалентной неоднородности, описываемого формулой (23), следует, что

$$\mathbf{D}^* = D^*\mathbf{I} = D_1/s_c\,\mathbf{I}, \tag{28}$$

т. е. материал эквивалентной неоднородности изотропен.

Видно, что компоненты тензора $\mathbf{D}^*$ зависят только от параметра сегрегации и диффузионной проницаемости неоднородности, но не зависят от ее формы. Увеличение параметра сегрегации приводит к уменьшению диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности. При отсутствии оседания примеси (при $s_c = 1$) $D^* = D_1$. В зависимости от того, оседает примесь на границе раздела фаз снаружи или внутри, параметр сегрегации принимает соответственно значения $s_c > 1$ или $s_c < 1$.

В первом случае $D^* < D_1$, что отражает физику процесса, поскольку примесь проникает в неоднородность в меньшей степени и, чтобы добиться такого же эффекта при рассмотрении эквивалентной неоднородности, необходимо уменьшить ее проницаемость.

Во втором случае $D^* > D_1$, что также физически обосновано, так как эквивалентная неоднородность должна быть более проницаемой для примеси ввиду ее скопления внутри «реальной» неоднородности с неидеальным контактом.

При $s_c \to \infty$ $D^* \to 0$; это объясняется тем, что вся примесь скапливается снаружи неоднородности и она непроницаема для диффузанта.

При $s_c = D_1/D_0$ имеем $D^* = D_0$, т. е. наличие скачка концентрации

$$[c] = \left(D_1 - D_0\right)/D_0\, c\left(\mathbf{x}\right)\Big|_{\mathbf{x}\to\Gamma-}$$

позволяет игнорировать присутствие неоднородности при нахождении эффективных свойств.

В случае использования второго подхода к моделированию неидеального контакта, из равенства тензора вклада неоднородности с эквивалентной поверхностной сопротивляемостью (см. формулу (24)) и тензора вклада эквивалентной неоднородности (см. выражение (23)) следует, что

$$\mathbf{D}^* = \sum_{i=1}^{3} D_1 \frac{1 - R\dfrac{S_a a_1}{V_a}\dfrac{D_0}{D_1}\dfrac{F_i}{H}\left(1 - A_i\right)}{1 + R\dfrac{S_a a_1}{V_a}\left(A_i - \dfrac{F_i}{H}\left(1 - A_i\right)\right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i; \tag{29}$$

здесь для удобства введен безразмерный параметр эквивалентной поверхностной сопротивляемости $R = D_1\beta/a_1$.

Тензор диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, выраженный формулой (29), в общем случае ортотропен, группа его симметрии определяется формой неоднородности. При отсутствии поверхностного эффекта (при $R = 0$) тензор изотропен и $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_1$ $\left(D_{11}^* = D_{22}^* = D_{33}^* = D_1\right)$. В общем случае коэффициенты диффузии D_{ii}^* могут принимать значения как большие D_1, так и меньшие. Отметим, что при определенных значениях структурных характеристик (отношение коэффициентов диффузии примеси в матрице и в неоднородности, параметры формы неоднородности, величина эквивалентной поверхностной сопротивляемости) формально могут проявляться такие особенности, как перенаправление диффузионного потока вследствие появления отрицательных значений компонент тензора $\mathbf{D}^*$, а также возникновение бесконечной проницаемости эквивалентной неоднородности. Такие случаи нуждаются в отдельных качественном и количественном исследованиях, что выходит за рамки данной статьи.

Выражение (29) существенно упрощается в случае сферической неоднородности: тогда эквивалентная неоднородность характеризуется изотропным тензором

$$\mathbf{D}^* = D_1/\left(1 + R\right)\mathbf{I}.$$

Из сравнения этого выражения с выражением (28) следует, что два подхода к моделированию неидеальных контактов на границе сферических неоднородностей совпадают при

$$s_c = 1 + R. \tag{30}$$

Перейдем к рассмотрению неидеального контакта, когда в материале присутствуют дополнительные обходные пути диффузии на границе раздела фаз. При моделировании такого контакта посредством задания скачка нормальной компоненты потока через параметр сегрегации, из равенства тензоров вклада, определяемых выражениями (27) и (23), следует, что

$$\mathbf{D}^* = D^*\mathbf{I} = D_1 s_f \mathbf{I}. \tag{31}$$

Тензор диффузии $\mathbf{D}^*$, определяемый формулой (31), зависит только от параметра сегрегации и от диффузионной проницаемости неоднородности и не зависит от ее формы.

Увеличение параметра сегрегации приводит к увеличению диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности. При отсутствии поверхностных дефектов (при $s_f = 1$) $D^* = D_1$. При $s_f \to \infty$ эквивалентная неоднородность характеризуется бесконечной проницаемостью независимо от свойств неоднородности (в этом случае вся примесь будет мгновенно диффундировать по поверхности). В случае $s_f = D_0/D_1$ выполняется равенство $D^* = D_0$.

При моделировании неидеального контакта с использованием второго подхода, равенство тензоров вклада, определяемых выражениями (25) и (23), дает следующий результат:

$$\mathbf{D}^{*}=\sum_{i=1}^{3}D_{1}\frac{1+K\frac{S_{a}a}{V_{a}}\left(1-A_{i}+\frac{F_{i}}{H}\right)}{1+K\frac{S_{a}a}{V_{a}}\frac{D_{1}}{D_{0}}\frac{F_{i}}{H}A_{i}}\mathbf{e}_{i}\mathbf{e}_{i},\qquad(32)$$

где введен безразмерный параметр эквивалентной поверхностной проницаемости $K = \lambda/(D_1 a_1)$.

Тензор диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, определяемый выражением (32), в общем случае ортотропен. При отсутствии поверхностного эффекта (при $K = 0$) $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_1$. При наличии поверхностного эффекта коэффициенты диффузии могут принимать значения и больше D_1, и меньше. В определенном диапазоне значений структурных характеристик, как и в случае изолирующего покрытия, компоненты D^*_{ii} могут принимать значения меньше нуля, что с физической точки зрения означает перенаправление потока, а также обращаться в бесконечность. Оба случая требуют отдельного исследования, выходящего за рамки настоящей работы.

Выражение (32) в случае сферических неоднородностей имеет вид

$$\mathbf{D}^{*}=D_{1}\left(1+2K\right)\mathbf{I},$$

откуда следует, с учетом формулы (31), что два подхода к моделированию неидеальных контактов эквивалентны при

$$s_{f}=1+2K.\qquad(33)$$

Подводя итог, можно отметить следующие качественные различия между двумя подходами к моделированию неидеальных контактов.

1. При учете неидеального контакта посредством задания скачка поля через постоянный параметр сегрегации, группа симметрии тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности совпадает с таковой для исходной неоднородности (в частности, выше было показано, что изотропия тензора $\mathbf{D}_1$ влечет за собой изотропию тензора $\mathbf{D}^*$; более подробное исследование общего анизотропного случая представлено нами в статье [8]). В результате компоненты тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности зависят только от физических свойств неоднородности и параметра сегрегации. В случае моделирования неидеального контакта путем рассмотрения неоднородности с поверхностным эффектом, компоненты тензора $\mathbf{D}^*$ зависят как от свойств покрытия и материала неоднородности, так и от ее формы.

Два подхода к моделированию неидеальных контактов приводят к одним и тем же результатам только в случае материала со сферическими неоднородностями, при условии выполнения либо равенства (30), либо (33), в зависимости от типа неидеального контакта.

2. При учете неидеального контакта посредством задания скачка поля через постоянный параметр сегрегации, компоненты тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности линейно зависят либо от величины $(s_c)^{-1}$, либо от параметра s_f. В случае моделирования неидеального контакта через рассмотрение неоднородности с поверхностным эффектом, компоненты тензора $\mathbf{D}^*$ нелинейно зависят от характеристик покрытия R или K (или обратных к ним величин). При этом данные зависимости, во-первых, различны для разных направлений, во-вторых, при определенных значениях характеристик структуры, могут принимать отрицательные значения, что, по всей видимости, означает перенаправление диффузионного потока, а также обращаться в бесконечность. Эти случаи нуждаются в дальнейшем исследовании на предмет соответствия физическим представлениям о моделируемом явлении.

Результаты моделирования неидеальных контактов

Проведем количественный анализ влияния способа учета неидеального контакта на границе раздела фаз на диффузионную проницаемость эквивалентной неоднородности на примере поликристалла.

Поликристалл будем считать двухфазным материалом, состоящим из матрицы, которая моделирует границы зерен, и вытянутых сфероидальных неоднородностей, моделирующих зерна меньшей диффузионной проницаемости [7, 16]. Примем для определенности значения $D_1/D_0 = 0{,}2$, $\gamma = a_3/a = 100$ ($a_1 = a_2 = a$). В поликристаллах неидеальные контакты могут возникать по разным причинам, что должно моделироваться разными способами. Дадим их краткое описание.

1. Явление сегрегации, которое характерно для диффузии и под которой понимается оседание примеси по границам зерен с внешней стороны, можно моделировать либо через задание скачка концентрации с помощью параметра сегрегации s_c (I), либо за счет рассмотрения изолирующего покрытия с эквивалентной сопротивляемостью R (II). Допустим, что $s_c = 1 + R$, что, с одной стороны, справедливо для случая материала со сферическими неоднородностями, с другой, удовлетворяет условию $s_c = 1$ при $R = 0$ в случае идеальных контактов в материале с неоднородностями произвольной формы.

2. За счет растрескивания, по границам зерен могут образовываться дополнительные ускоренные пути диффузии; их можно учесть либо путем задания скачка нормальной компоненты потока через параметр сегрегации s_f (III), либо путем рассмотрения проводящего покрытия, характеризующегося эквивалентной проводимостью K (IV). По тем же соображениям, что и при выборе зависимости $s_c(R)$, примем, что $s_f = 1 + 2K$.

Зависимости диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности при наличии сегрегации, т. е. в случае неидеального контакта, моделируемого способами I и II, представлены на рис. 1,*a*. Увеличение параметра R приводит к уменьшению компонент тензора $\mathbf{D}^*$. Это, в свою очередь, должно привести впоследствии (при дальнейшем применении методов гомогенизации, не рассматриваемых в рамках настоящей работы) к уменьшению эффективной проницаемости материала.

Отметим, что параметр R формально может принимать значения от нуля до бесконечности. Для проведения количественного анализа мы, тем не менее, ограничились рассмотрением меньшего диапазона, при котором поток не меняет направление на противоположное, что имело бы место при отрицательных значениях коэффициентов D_{ii}^* и что, как отмечалось выше, нуждается в проведении дополнительного анализа.

Стоит также отметить, что при использовании подхода II наблюдается разница в поведении кривых убывания коэффициентов диффузии D_{33}^* вдоль оси симметрии неоднородности и коэффициентов $D_{11}^* = D_{22}^*$ в плоскости изотропии.

При выбранном наборе параметров структуры, коэффициенты $D_{11}^* = D_{22}^*$ изменяются так же, как и компоненты изотропного тензора $\mathbf{D}^*$, вводимого при использовании I подхода.

Зависимости диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности при наличии растрескивания, т.е. случае неидеального контакта, моделируемого способами III и IV, представлены на рис. 1,*b*.

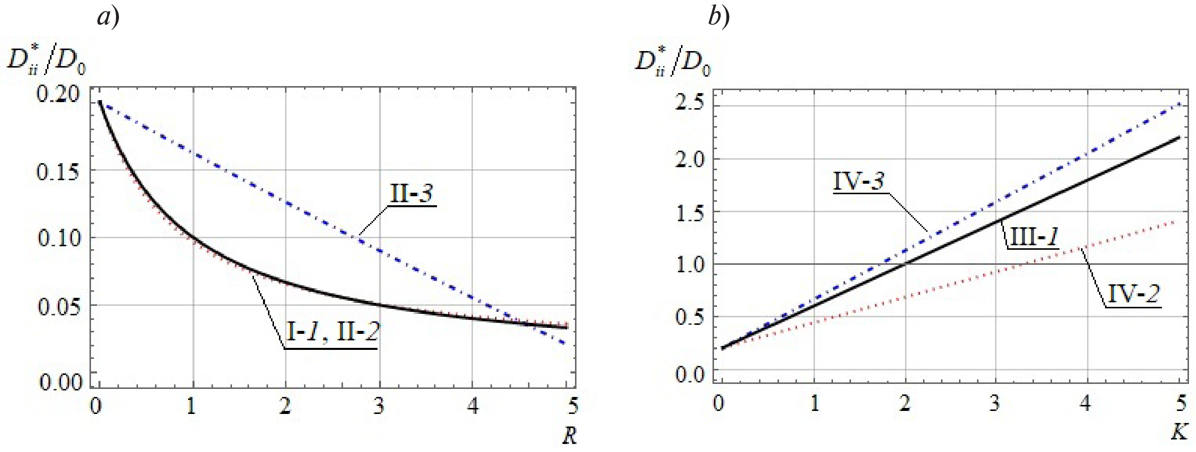


Рис. 1. Зависимости коэффициентов диффузии примеси в эквивалентной неоднородности от параметров R (*a*) и K (*b*) для случая неидеального контакта, моделируемого способами I, II (*a*) и III, IV (*b*) (см. пояснения в тексте).

Представлены следующие коэффициенты диффузии: $D_{11}^* = D_{22}^* = D_{33}^*$ (сплошные линии I-*1* и III-*1*) при использовании подходов I и III; $D_{11}^* = D_{22}^*$ (точечные линии II-*2* и IV-*2*) и D_{33}^* (линии II-*3* и IV-*3*) при использовании подходов II и IV

Увеличение параметра *K* приводит к возрастанию компонент тензора $\mathbf{D}^*$, которые изменяются по-разному, в зависимости от способа моделирования неидеального контакта, а также от направления в случае подхода IV. В дальнейшем такой характер изменения проницаемости эквивалентной неоднородности должен привести и к увеличению эффективной проницаемости материала. Параметр *K*, как и параметр *R*, формально может принимать значения от нуля до бесконечности, при этом при некотором значении *K* компонента обратится в бесконечность, что, как обсуждалось выше, нуждается в проведении дополнительного анализа, выходящего за рамки настоящей статьи.

Важно, что компоненты D^*_{ii} принимают значения как меньшие, так и большие D_0, в зависимости от величины *K* (D^*_{ii}/D_0 может быть как меньше, так и больше единицы).

Таким образом, способ учета неидеального контакта на границе раздела матрицы и несферической неоднородности оказывает непосредственное влияние на эффективные свойства материала. Для выбора оптимального подхода необходимо сравнивать результаты численного моделирования с экспериментальными данными. Вопрос такого сравнения сопряжен, в свою очередь, со сложностями идентификации характеристик структуры и требует отдельного исследования.

Заключение

В работе предложено обобщение имеющихся в литературе подходов к моделированию неидеальных контактов на границе раздела фаз неоднородного на микроуровне материала при определении его эффективных свойств различной природы.

Учтено, что такие контакты могут возникать в материале по разным причинам: в силу особенной внутренней структуры и в связи со спецификой описываемого процесса, что влияет на физическую интерпретацию модели, но не влияет на используемый математический аппарат. Конкретизация проведена на примере диффузионной задачи. Рассмотрен общий случай материала с эллипсоидальными неоднородностями и проведено сравнение двух подходов к моделированию неидеальных контактов: посредством введения скачка поля (концентрации или нормальной компоненты потока) через постоянный параметр сегрегации и посредством рассмотрения неоднородности с поверхностным эффектом (соответственно с наличием изолирующего или проводящего покрытия).

Показано, что два подхода эквивалентны только в случае материала со сферическими неоднородностями, тогда как в иных случаях данные способы дают качественно и количественно разные результаты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kaur I., Mishin Yu., Gust W.** Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. Third Edition. London: John Wiley & Sons, 1995. 536 p.
2. **Zhang Y., Liu L.** On diffusion in heterogeneous media // American Journal of Science. 2012. Vol. 312. No. 9. Pp. 1028—1047.
3. **Dumont S., Serpilli M., Rizzoni R., Lebon F. C.** Numerical validation of multiphysic imperfect interfaces models // Frontiers in Materials. 2020. Vol. 7. 05 June. P. 158.
4. **Costa R., Nobrega J. M., Clain S., Machado G. J.** Very high-order accurate polygonal mesh finite volume scheme for conjugate heat transfer problems with curved interfaces and imperfect contacts // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2019. Vol. 357. 1 December. P. 112560.
5. **Kalnin J. R., Kotomin E. A., Maier J.** Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2002. Vol. 63. No. 3. Pp. 449—456.
6. **Belova I. V., Murch G. E.** Calculation of the effective conductivity and diffusivity in composite solid electrolytes // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2005. Vol. 66. No. 5. Pp. 722—728.
7. **Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I.** On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material // Philosophical Magazin. 2015. Vol. 95. No. 19. Pp. 2046—2066.
8. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.** Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores // Materials Physics and Mechanics. 2021. Vol. 47. No. 6. Pp. 937—950.

9. **Markov K. Z.** Elementary micromechanics of heterogeneous media. Heterogeneous media: micromechanics modeling methods and simulations. Boston, USA: Birkhäuser, MA, 2000. 162 p.

10. **Endres A. L., Knight R. J.** A model for incorporating surface phenomena into the dielectric response of a heterogeneous medium // Journal of Colloid and Interface Science. 1993. Vol. 157. No. 2. Pp. 418–425.

11. **Levin V., Markov M.** Effective thermal conductivity of micro-inhomogeneous media containing imperfectly bonded ellipsoidal inclusions // International Journal of Engineering Science. 2016. Vol. 109. December. Pp. 202–215.

12. **Markov M., Levin V., Markova I.** Determination of effective electromagnetic parameters of concentrated suspensions of ellipsoidal particles using Generalized Differential Effective Medium approximation // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. Vol. 492. 15 February. Pp. 113–122.

13. **Фролова К. П., Вильчевская Е. Н., Полянский В. А.** Моделирование неидеальных контактов при определении эффективных коэффициентов диффузии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2023. Т. 10(68). № 4. С. 650–664.

14. **Kachanov M., Sevostianov I.** Micromechanics of materials, with applications. Series “Solid Mechanics and its Applications”. Vol. 249. Berlin, Germany: Springer, 2018. 712 p.

15. **Fricke H.** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // Physical Review. 1924. Vol. 24. No. 5. Pp. 575–587.

16. **Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н.** Эффективные диффузионные свойства поликристалла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 154–168.

REFERENCES

1. **Kaur I., Mishin Yu., Gust W.,** Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion, Third Edition, John Wiley & Sons, London, 1995.

2. **Zhang Y., Liu L.,** On diffusion in heterogeneous media, Am. J. Sci. 312 (9) (2012) 1028–1047.

3. **Dumont S., Serpilli M., Rizzoni R., Lebon F. C.,** Numerical validation of multiphysic imperfect interfaces models, Front. Mater. 7 (5 June) (2020) 158.

4. **Costa R., Nobrega J. M., Clain S., Machado G. J.,** Very high-order accurate polygonal mesh finite volume scheme for conjugate heat transfer problems with curved interfaces and imperfect contacts, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 357 (1 Dec) (2019) 112560.

5. **Kalnin J. R., Kotomin E. A., Maier J.,** Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media, J. Phys. Chem. Solids. 63 (3) (2002) 449–456.

6. **Belova I. V., Murch G. E.,** Calculation of the effective conductivity and diffusivity in composite solid electrolytes, J. Phys. Chem. Solids. 66 (5) (2005) 722–728.

7. **Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I.,** On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material, Philos. Mag. 95 (19) (2015) 2046–2066.

8. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.,** Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores, Mater. Phys. Mech. 47 (6) (2021) 937–950.

9. **Markov K. Z.,** Elementary micromechanics of heterogeneous media. Heterogeneous media: micromechanics modeling methods and simulations, Birkhäuser, Boston, MA, 2000.

10. **Endres A. L., Knight R. J.,** A model for incorporating surface phenomena into the dielectric response of a heterogeneous medium, J. Colloid Interface Sci. 157 (2) (1993) 418–425.

11. **Levin V., Markov M.,** Effective thermal conductivity of micro-inhomogeneous media containing imperfectly bonded ellipsoidal inclusions, Int. J. Eng. Sci. 109 (Dec) (2016) 202–215.

12. **Markov M., Levin V., Markova I.,** Determination of effective electromagnetic parameters of concentrated suspensions of ellipsoidal particles using Generalized Differential Effective Medium approximation, Phys. A: Stat. 492 (15 Febr) (2018) 113–122.

13. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.,** Modeling of imperfect contacts in determining the effective diffusion permeability, Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy. 10 (68) (4) (2023) 650–664 (in Russian).

14. **Kachanov M., Sevostianov I.,** Micromechanics of materials, with applications. Ser. “Solid Mechanics and its Applications” (Vol. 249), Springer, Berlin, 2018.

15. **Fricke H.,** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids, Phys. Rev. 24 (5) (1924) 575–587.

16. **Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.,** Effective diffusion properties of a polycrystal, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 154–168 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФРОЛОВА Ксения Петровна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
fkp@ipme.ru
ORCID: 0000-0003-0376-4463

ВИЛЬЧЕВСКАЯ Елена Никитична – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

THE AUTHORS

FROLOVA Ksenia P.
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
kspfrolova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0376-4463

VILCHEVSKAYA Elena N.
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

Статья поступила в редакцию 22.09.2023. Одобрена после рецензирования 23.10.2023. Принята 23.10.2023.

Received 22.09.2023. Approved after reviewing 23.10.2023. Accepted 23.10.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Биофизика и медицинская физика

Научная статья
УДК 517.95+577.3+535.8+519.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16413

НАХОЖДЕНИЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ НЕРЕГУЛЯРНОЙ ФОРМЫ ПО РАЗМЕРАМ ДЛЯ КЛЕТОК ЧЕЛОВЕЧЕСКОЙ КРОВИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЕЕ ЭРИТРОЦИТАРНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ (*IN VIVO*)

А. П. Головицкий [1], В. Г. Концевая [2, 1]✉,
К. Г. Куликов [1], Т. В. Кошлан [3]

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

[2] Псковский государственный университет, г. Псков, Россия;

[3] Университет имени Бен-Гуриона, Беер-Шева, Израиль

✉ nkoncevoi@mail.ru

Аннотация. Данная статья продолжает исследования авторов, направленные на построение и развитие математической модели, используемой как для определения функции распределения клеток крови человека по размерам *in vivo*, так и для нахождения показателей крови, используемых в медицинской практике. На данном этапе работы была учтена несферичность частиц крови и оптимизирована сходимость процессов, описывающих многократное рассеяние лазерного излучения кровью за счет использования метода расширенных граничных условий, что позволило увеличить возможности применения *T*-матричного метода. Математическая модель анализа биологических процессов получила материальное воплощение в новом программном комплексе. Параметры регуляризации определяются автоматически по заданным погрешностям ядра и «измеренным» данным с использованием разных критериев. Показана возможность теоретически предсказывать, используя разработанную модель, количество аномальных по размеру эритроцитов в биоматериале на основе измерения ширины найденного распределения эритроцитов по размерам.

Ключевые слова: лазерные технологии, многократное рассеяние, метод *T*-матриц, метод регуляризации Тихонова, эритроцитарный индекс, несферулированная частица

Для цитирования: Головицкий А. П., Концевая В. Г., Куликов К. Г., Кошлан Т. В. Нахождение функции распределения частиц нерегулярной формы по размерам для клеток человеческой крови и определение ее эритроцитарных показателей (*in vivo*) // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 160–180. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16413

Originalarticle
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16413

DETERMINING THE SIZE DISTRIBUTION FUNCTION OF IRREGULARLY SHAPED PARTICLES FOR HUMAN BLOOD CELLS AND FINDING THEIR ERYTHROCYTE PARAMETERS (*IN VIVO* CASE)

A. P. Golovitskii [1], V. G. Kontsevaya [2, 1]✉,
K. G. Kulikov [1], K. T. Koshlan [3]
[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;
[2] Pskov State University, Pskov, Russia;
[3] Ben-Gurion University of Negel, Beer Sheva, Israel
✉ nkoncevoi@mail.ru

Abstract. This article continues the authors' research aimed at constructing and developing a mathematical model used both to determine the size distribution function of human blood cells *in vivo*, and to find blood parameters used in medical practice. At this stage of the work, the nonsphericity of blood particles was taken into account and the convergence of processes describing multiple scattering of laser radiation by blood was optimized through the use of the method of extended boundary conditions, which made it possible to increase the possibilities of using the *T*-matrix method. The mathematical model for the analysis of biological processes has received material embodiment in a new software package. Regularization parameters are determined automatically based on specified kernel errors and "measured" data using different criteria. It is shown that, using the developed model, it is possible to theoretically predict the number of erythrocytes of abnormal size in a biomaterial based on measuring the width of the found erythrocyte size distribution.

Keywords: laser technologies, Tikhonov regularization, EBCM, erythrocyte index, unspherulated particle

For citation: Golovitskii A. P., Kontsevaya V. G., Kulikov K. G., Koshlan K. T., Determining the size distribution function of irregularly shaped particles for human blood cells and finding their erythrocyte parameters (*in vivo* case), St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 160–180. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16413

Введение

Гемореологические и микроциркуляторные дисфункции организма человека сопровождают, как правило, подавляющее число его заболеваний и осложнений. Поскольку 99 % от общего объема форменных элементов крови составляют эритроциты, изучение функциональных особенностей этих клеток становится первоочередной задачей. Характерные размеры эритроцитов, их показатели преломления и механические свойства, а также динамика изменений подобных индикаторов состояния организма несомненно должны исследоваться в случаях различных патологических состояний; такие исследования всегда актуальны.

Эритроцит человека представляет собой эластичную клетку, имеющую в нормальном зрелом состоянии довольно сложную дисковидную форму. Более того, под различными внешними воздействиями, при патологиях разного рода, дисконцит (зрелая нормальная форма эритроцита) может претерпевать переход в другие формы, например платицид, аканоцид и т. п. [1].

В ряде работ (см., например, [2 – 5]) изучались возможности теоретического исследования оптических характеристик диэлектрических тел разной формы и структуры.

Классическая задача о рассеянии светового излучения на частицах нерегулярной формы реализуется прямыми численными методами, которые позволяют свести данную проблему к решению системы алгебраических уравнений либо к методу разделения переменных. В первом случае или составляют интегральное уравнение, или вводят разложение полей по векторным сферическим гармоникам – решениям волнового уравнения Гельмгольца с последующей их «сшивкой» на поверхности рассеивателя.

Стоит, на наш взгляд, перечислить некоторые удачные аппроксимации, позволяющие получать вполне удовлетворительные результаты.

Во-первых, это метод Рэлея – Ганса – Дебая [6]. Во-вторых, допустимо использовать методы геометрической оптики, особенно в тех случаях, когда частицы можно считать достаточно крупными относительно длины волны падающего излучения [7]. В-третьих, это методы аномальной дифракции [8, 9]. Далее, заслуживают особого упоминания итерационные методы [10]. Можно также отметить метод ВКБ (Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна), а также эйкональное приближение [11, 12] как наиболее известное в методе аномальной дифракции. Последнее есть, по сути, реализация приближения коротких волн либо высоких энергий. Стоит также выделить метод возмущений [13], который основан на разложении неизвестного решения задачи рассеяния по малому параметру в окрестности точного решения. В применении к несферическим частицам это означает, что решение ищется в виде малых отклонений от решения Ми, которые вызваны малыми отклонениями формы от идеальной сферической.

Наиболее удобным и надежным подходом к решению задачи светорассеяния на телах произвольной формы является, на наш взгляд, метод интегральных уравнений, получивший название метода расширенных граничных условий [14, 15], так как он дает точное решение задачи рассеяния (в отличие от остальных методов) на частице произвольной формы, хотя это решение и имеет вид бесконечных рядов, но это допустимо. Максимальное число членов разложения, которое требуется для достижения приемлемой точности, зависит от размера, формы и показателя преломления рассеивателя.

В настоящей работе мы исследуем некоторые аспекты проблемы светорассеяния на дисперсных элементах (здесь это клетки крови), которые нерегулярны по форме и локализованы в среде нетривиальной структуры (здесь это кожа – многослойное образование).

Ставится задача моделирования рассеяния на дисперсных структурах с нерегулярной конфигурацией.

Исследование предполагает рассмотрение светорассеяния на дисперсной системе (форменные элементы крови), где форма неоднородностей нерегулярна, а их ориентация произвольна. При этом учитываются эффекты многократного рассеяния света, падающего на слоистую среду (кожа человека).

Такое рассмотрение включает несколько этапов.

На первом этапе решается задача светорассеяния на системе.

На втором этапе изучается коэффициент отражения плоской волны от слоисто-структурированной поверхности, имеющей волнистую форму (берется случай отражения гауссова пучка).

На третьем, заключительном, этапе осуществляется поиск функции распределения по размерам форменных элементов крови (рассеиватели нерегулярной формы, помещенные в слоистую среду). Важно учитывать, что моделируемая система предполагается помещенной в слоистую среду.

Светорассеяние на *j*-й индивидуальной частице произвольной формы (матричная формулировка)

Начнем рассмотрение проблемы с допущения, что в моделируемой дисперсной среде (кровь) присутствуют только эритроциты. Оно вполне уместно и не противоречит постановке задачи, поскольку доля прочих форменных клеток крови составляет около 1% гематокрита.

В ряде работ эритроцит рассматривается как структурно-однородная сфера [16, 17], что можно считать первым приближением. При более глубоком анализе (микроскопический уровень) корректнее рассматривать эритроцит как тело нерегулярной формы.

Для нахождения рассеянного поля на группе частиц, имеющих нерегулярную форму, будем использовать метод *T*-матриц. Для последнего характерно быстродействие, по сравнению с большинством других методов теории дифракции света, основанных на строгом решении уравнений Максвелла.

Дисперсно-неоднородная среда рассматривается в трехмерной системе координат, и на совокупность неоднородностей падает линейно-поляризованная плоская волна. Предполагается, что длина волны меньше типичных размеров эритроцитов, что поверхность дисперсного рассеивателя всюду регулярная, поэтому для нее можно определить непрерывную нормаль; также справедлива теорема Грина.

Запишем систему уравнений Максвелла для электромагнитного поля в окрестности частицы с условным номером j_0, искаженного присутствием других частиц:

$$\nabla\times\mathbf{H}=-ik\varepsilon\mathbf{E},\ \ \nabla\times\mathbf{E}=ik\mu\mathbf{H},\ \ \nabla\cdot\mathbf{E}=0,\ \ \nabla\cdot\mathbf{H}=0,$$

где k – волновое число; ε, μ – величины диэлектрической и магнитной проницаемости среды.

На границе между частицей с условным номером j_0 и окружающей ее средой потребуем выполнения граничных условий:

$$\mathbf{n}\times\mathbf{E}_i-\mathbf{n}\times\mathbf{E}_s=\mathbf{n}\times\mathbf{E}_I,\ \mathbf{n}\times\mathbf{H}_i-\mathbf{n}\times\mathbf{H}_s=\mathbf{n}\times\mathbf{H}_I, \tag{1}$$

где $\mathbf{E}_i$, $\mathbf{E}_s$, $\mathbf{E}_I$ – внутреннее, рассеянное и падающее поля, соответственно.

Суммарное поле можно представить в виде

$$\mathbf{E}(r')=\mathbf{E}_I(r')+\mathbf{E}_s(r').$$

Запишем соответствующее интегральное уравнение следующего вида [18]:

$$\mathbf{E}_I(r')+\nabla\times\int_s\mathbf{n}\times\mathbf{E}(r)G(r,r')ds+\frac{i}{k\varepsilon}\nabla\times\nabla\times\int_s\mathbf{n}\times\mathbf{H}(\mathrm{r})\times G(r,r')ds=0. \tag{2}$$

В уравнении (2) функция Грина определена следующим образом [18]:

$$\begin{aligned}G(r,r')=\frac{ik}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m E_{mn}[\mathbf{M}^3_{-mn}(kr,\theta,\varphi)\cdot\mathbf{M}^1_{mn}(kr',\theta',\varphi')+\\+\mathbf{N}^3_{-mn}(kr,\theta,\varphi)\cdot\mathbf{N}^1_{mn}(kr',\theta',\varphi')]\end{aligned} \tag{3}$$

(для случая $r>r'$),

$$\begin{aligned}G(r,r')=\frac{ik}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m E_{mn}[\mathbf{M}^1_{-mn}(kr,\theta,\varphi)\cdot\mathbf{M}^3_{mn}(kr',\theta',\varphi')+\\+\mathbf{N}^1_{-mn}(kr,\theta,\varphi)\cdot\mathbf{N}^3_{mn}(kr',\theta',\varphi')]\end{aligned} \tag{4}$$

(для случая $r'>r$),
где $\mathbf{M}_{mn}$, $\mathbf{N}_{mn}$, $\mathbf{M}_{-mn}$, $\mathbf{N}_{-mn}$ – векторные сферические гармоники.

Отметим, что выбор векторных сферических гармоник следует делать на основе свойства инвариантности (в смысле замкнутости), а именно – при вращении системы координат такие гармоники $\mathbf{M}_{mn}$, $\mathbf{N}_{mn}$ должны преобразовываться независимо друг от друга.

Искомым свойствам инвариантности удовлетворяют следующие векторные сферические гармоники [18]:

$$\mathbf{M}^J_{mn}(rk)=(-1)^m d_n z^J_n(kr)\mathbf{C}_{mn}(\theta)\exp(im\varphi), \tag{5}$$

$$\mathbf{N}^J_{mn}(rk)=(-1)^m d_n\left[\frac{n(n+1)}{kr}z^J_n(kr)\mathbf{P}_{mn}(\theta)+\frac{1}{kr}\mathrm{z}^J_n\,\mathbf{B}_{mn}(\theta)\right]\exp(im\varphi), \tag{6}$$

$$\mathbf{B}_{mn}(\theta)=\mathbf{i}_\theta\frac{d}{d\theta}d^n_{om}(\theta)+\mathbf{i}_\varphi\frac{im}{\sin\theta}d^n_{om}(\theta), \tag{7}$$

$$\mathbf{C}_{mn}(\theta) = \mathbf{i}_\theta \frac{im}{\sin\theta} d^n_{om}(\theta) - \mathbf{i}_\varphi \frac{d}{d\theta} d^n_{om}(\theta), \tag{8}$$

$$\mathbf{P}_{mn}(\theta) = \mathbf{i}_r d^n_{om}(\theta),\ d_n = \sqrt{\frac{2n+1}{4n(n+1)}}. \tag{9}$$

В качестве функции z_n^J может быть выбрана любая из четырех сферических гармоник вида

$$j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z),\ y_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{n+\frac{1}{2}}(z),\ h_z^{(1)} = j_n(z) + iy_n(z),\ h_z^{(2)} = j_n(z) - iy_n(z),$$

$$d^n_{om}(\theta) = \frac{(-1)^{n-m}}{2^n n!}\left[\frac{(n+m)!}{(n\text{-}m)!}\right]^{1/2} (1-\cos^2\theta)^{-m/2} \frac{d^{n-m}}{d\left(\cos\theta\right)^{n-m}}\left(1-\cos^2\theta\right)^n.$$

Запишем разложение падающей волны $\mathbf{E}_I$ на поверхность j-ой частицы по векторным сферическим гармоникам:

$$\mathbf{E}_I(j) = -\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left(p^j_{mn}\mathbf{N}^1_{mn} + q^j_{mn}\mathbf{M}^1_{mn}\right). \tag{10}$$

Аналогично можно выписать разложение по векторным сферическим гармоникам как для внутреннего поля j-ой частицы $E_i(j)$, так и для рассеянного поля $E_s(j)$:

$$\mathbf{E}_i(j) = -\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left(d^j_{mn}\mathbf{N}^1_{mn} + c^j_{mn}\mathbf{M}^1_{mn}\right), \tag{11}$$

$$\mathbf{E}_s(j) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left(a^j_{mn}\mathbf{N}^3_{mn} + b^j_{mn}\mathbf{M}^3_{mn}\right). \tag{12}$$

В соответствии с процедурами, описанными в монографии [18], последовательно подставим выражения (10), (11), (12), с учетом функций Грина (3), (4) и граничных условий вида (1), в интегральное уравнение (2); тогда получим:

$$\frac{ik^2}{\pi}\int_s \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m\left(c^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{M}^1_{m'n'} + d^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{N}^1_{m'n'}\right)\begin{pmatrix}\mathbf{N}^3_{-mn}\\ \mathbf{M}^3_{-mn}\end{pmatrix}ds +$$

$$+\frac{ik^2}{\pi}\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\int_s \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m\left(c^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{N}^1_{m'n'} + d^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{M}^1_{m'n'}\right)\begin{pmatrix}\mathbf{M}^3_{-mn}\\ \mathbf{N}^3_{-mn}\end{pmatrix}ds = -\begin{pmatrix}p^j_{mn}\\ q^j_{mn}\end{pmatrix}.$$

В матричной форме это выражение можно переписать как

$$\begin{pmatrix} I_1^{21} + \tilde{m}\cdot I_1^{12} & I_1^{22} + \tilde{m}\cdot I_1^{11}\\ I_1^{22} + \tilde{m}\cdot I_1^{11} & I_1^{12} + \tilde{m}\cdot I_1^{21}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d^j\\ c^j\end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix}p^j\\ q^j\end{pmatrix}, \tag{13}$$

где $\tilde{m}$ – относительный показатель преломления частицы.

Далее,

$$\frac{ik^2}{\pi}\int_s \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m\left(c^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{M}^1_{m'n'} + d^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{N}^1_{m'n'}\right)\begin{pmatrix}\mathbf{N}^1_{-mn}\\ \mathbf{M}^1_{-mn}\end{pmatrix}ds +$$

$$+\frac{ik^2}{\pi}\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\int_s \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^m\left(c^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{N}^1_{m'n'} + d^j_{mn}\mathbf{n}\times\mathbf{M}^1_{m'n'}\right)\begin{pmatrix}\mathbf{M}^1_{-mn}\\ \mathbf{N}^1_{-mn}\end{pmatrix}ds = -\begin{pmatrix}a^j_{mn}\\ b^j_{mn}\end{pmatrix}.$$

В матричной форме это выражение запишется в виде

$$\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} I_1'^{21} + \tilde{m} \cdot I_1'^{12} & I_1'^{22} + \tilde{m} \cdot I_1'^{11} \\ I_1'^{22} + \tilde{m} \cdot I_1'^{11} & I_1'^{12} + \tilde{m} \cdot I_1'^{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d^j \\ c^j \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Результатом объединения выражений (13) и (14) будет формула вида

$$\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} I_1'^{21} + \tilde{m} \cdot I_1'^{12} & I_1'^{22} + \tilde{m} \cdot I_1'^{11} \\ I_1'^{22} + \tilde{m} \cdot I_1'^{11} & I_1'^{12} + \tilde{m} \cdot I_1'^{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1^{21} + \tilde{m} \cdot I_1^{12} & I_1^{22} + \tilde{m} \cdot I_1^{11} \\ I_1^{22} + \tilde{m} \cdot I_1'^{11} & I_1^{12} + \tilde{m} \cdot I_1^{21} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} p^j \\ q^j \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Введем обозначения для матриц Q_{01}^{11}, Q_{01}^{31} и перепишем выражение (15) в более компактном виде:

$$\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix} = T_1^j \begin{pmatrix} p^j \\ q^j \end{pmatrix}, \; T_1^j = -Q_{01}^{11}(k, k_1) \cdot \left[Q_{01}^{31}(k, k_1) \right]^{-1}, \tag{16}$$

причем элементы T_1^j-матрицы выражаются в виде поверхностных интегралов.

Рассмотрим нормаль $\mathbf{n} = n_x\mathbf{i} + n_y\mathbf{j} + n_z\mathbf{k}$.

Для тела, расположенного произвольно, получаем следующее выражение:

$$\mathbf{n}dS = \frac{\partial(y,z)}{\partial(\theta,\varphi)}\mathbf{i} + \frac{\partial(z,x)}{\partial(\theta,\varphi)}\mathbf{j} + \frac{\partial(x,y)}{\partial(\theta,\varphi)}\mathbf{k},$$

где компоненты вектора следуют выражениям

$$n_x dS = \left[r(\theta,\varphi) r'_\varphi(\theta,\varphi) \sin\varphi + r^2(\theta,\varphi)\sin^2\theta\cos\varphi \right] d\theta d\varphi -$$

$$-r(\theta,\varphi) r'_\theta(\theta,\varphi) \sin^2\theta \cos\varphi d\theta d\varphi,$$

$$n_y dS = \left[-r(\theta,\varphi) r'_\varphi(\theta,\varphi) \cos\varphi + r^2(\theta,\varphi)\sin^2\theta\sin\varphi \right] d\theta d\varphi -$$

$$-r(\theta,\varphi) r'_\theta(\theta,\varphi) \sin^2\theta \sin\varphi d\theta d\varphi,$$

$$n_z dS = \left[r^2(\theta,\varphi)\sin^2\theta\sin\theta\cos\theta - r(\theta,\varphi) r'_\theta(\theta,\varphi)\sin^2\theta \right] d\theta d\varphi.$$

Уравнение поверхности частицы в сферической системе координат будет иметь следующий вид:

$$r(\theta,\varphi) = \left[\sin^2\theta \left(\frac{\cos^2\varphi}{a^2} + \frac{\sin^2\varphi}{b^2} \right) + \frac{\cos^2\theta}{c^2} \right]^{-1/2}. \tag{17}$$

Уточним вид уравнения для эллипсоида вращения:

$$r(\theta) = \left(\frac{\sin^2\theta}{a^2} + \frac{\cos^2\theta}{c^2} \right)^{-1/2} = \frac{ac}{\sqrt{a^2\cos^2\theta + c^2\sin^2\theta}}. \tag{18}$$

Отметим, что сфероид (эллипсоид вращения) получается вращением эллипса вокруг малой оси (сплюснутый эллипсоид) или большой оси (вытянутый эллипсоид). При этом две из трех полуосей этого эллипсоида имеют одинаковую длину. Соотношение сторон сфероида определяется как отношение большой полуоси a к малой c и описывает форму частицы, которая изменяется от сферы ($a/c = 1$) до диска для сплюснутого эллипсоида или иглы для вытянутого эллипсоида ($a/c \neq 1$).

Так, например, отношение a/c будет определять сплюснутый, а c/a – вытянутый сфероид. При этом a – длина полуоси вдоль осей x и y, а c – длина полуосей вдоль оси z, которая является осью вращения.

Использовав формулы перехода от декартовых координат к сферическим, получаем следующие выражения:

$$n_r dS = \left(n_x \sin\theta\cos\varphi + n_y \sin\theta\sin\varphi + n_z \cos\theta\right) d\theta d\varphi =$$

$$= r^2(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi,$$

$$n_\theta dS = \left(n_x \cos\theta\cos\varphi + n_y \cos\theta\sin\varphi - n_z \sin\theta\right) d\theta d\varphi =$$

$$= -r(\theta,\varphi) r'_\theta(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi,$$

$$n_\varphi dS = \left(n_y \cos\varphi - n_x \sin\varphi\right) d\theta d\varphi = -r(\theta,\varphi) r'_\theta(\theta,\varphi) d\theta d\varphi.$$

Далее подставляем в поверхностные интегралы выражения для $\mathbf{n}dS$, $\mathbf{N}^1_{mn}$, $\mathbf{M}^1_{mn}$, $\mathbf{N}^3_{mn}$, $\mathbf{M}^3_{mn}$ и получаем для них явные выражения:

$$I^{11}_{mnmn} = (-1)^{(m+m')}\int_0^\pi i\left[md^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om}(\theta) + m'd^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\right]\times$$
$$\times\left[\int_0^{2\pi} c_{mnmn}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta, \tag{19}$$

$$I^{12}_{mnm'n'} = (-1)^{(m+m')}\int_0^\pi -\left[b^{n'}_{om}\theta b^{n'}_{om'}(\theta)\sin(\theta) + mm'd^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta\right]\times$$
$$\times\left[\int_0^{2\pi} c^2_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] - \frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi} c^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] - \tag{20}$$
$$-i\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi} c^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,$$

$$I^{21}_{mnm'n'} = (-1)^{(m+m')}\int_0^\pi \frac{n'(n'+1)}{x_1}b^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi} c^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] -$$
$$-im\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta\left[\int_0^{2\pi} c^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] + \tag{21}$$
$$+mm'd^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta + b^{n'}_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi} c^5_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,$$

$$I^{22}_{mnm'n'} = (-1)^{(m+m')}\int_0^\pi i\left[md^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta) + m'd^{n'}_{om'}(\theta)b^n_{om}(\theta)\right]\times$$
$$\times\left[\int_0^{2\pi} c^6_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] +$$
$$+\frac{n'(n'+1)}{x_1}b^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi} c^7_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] - \frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\times \tag{22}$$
$$\times\left[\int_0^{2\pi} c^8_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] + im\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi} c^9_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right] +$$
$$+im'\frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi} c^{10}_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,$$

$$I'^{11}_{mnm'n'} = (-1)^{(m+m')}\int_0^\pi i\left[md^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om}(\theta) + m'd^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\right]\times$$
$$\times\left[\int_0^{2\pi} f^1_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta, \tag{23}$$

$$\begin{gathered}
I'^{12}_{mnm'n'}=(-1)^{(m+m')}\int_0^{\pi}-\left[b^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta+mm'd^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta\right]\times\\
\times\left[\int_0^{2\pi}f^2_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]-\frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi}f^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]-\\
-i\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi}f^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,
\end{gathered}\tag{24}$$

$$\begin{gathered}
I'^{21}_{mnm'n'}=(-1)^{(m+m')}\int_0^{\pi}\frac{n'(n'+1)}{x_1}b^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi}f^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]-\\
-im\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta\left[\int_0^{2\pi}f^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]+\\
+mm'd^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)/\sin\theta+\\
+b^{n'}_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\sin\theta\left[\int_0^{2\pi}f^5_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,
\end{gathered}\tag{25}$$

$$\begin{gathered}
I'^{22}_{mnm'n'}=(-1)^{(m+m')}\int_0^{\pi}i[md^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)+m'd^{n'}_{om'}(\theta)b^n_{om}(\theta)]\times\\
\times\left[\int_0^{2\pi}f^6_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]+\\
+\frac{n'(n'+1)}{x_1}b^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi}f^7_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]-\frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)b^{n'}_{om'}(\theta)\times\\
\times\left[\int_0^{2\pi}f^8_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]+im\frac{n'(n'+1)}{x_1}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi}f^9_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]+\\
+im'\frac{n(n+1)}{x}d^n_{om}(\theta)d^{n'}_{om'}(\theta)\left[\int_0^{2\pi}f^{10}_{mnm'n'}(\theta,\varphi)d\varphi\right]d\theta,
\end{gathered}\tag{26}$$

$$\begin{gathered}
c^1_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})h_n(x)j_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\ \ c^2_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)j_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\\
c^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})h_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\ \ c^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\\
c^5_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})h_n(x)v_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\ \ c^6_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)v_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\\
c^7_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\varphi},\ \ c^8_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})h_n(x)v_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\varphi},\\
c^9_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\ \ c^{10}_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})h_n(x)v_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\\
f^1_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})j_n(x)j_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\ \ f^2_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})v_n(x)j_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\\
f^3_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})j_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\ \ f^4_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})u_n(x)j_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\\
f^5_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})v_n(x)j_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\ \ f^6_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})v_n(x)u_n(x_1)r^2(\theta,\varphi),\\
f^7_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})v_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\varphi},\ \ f^8_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})j_n(x)v_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\varphi},\\
f^9_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})v_n(x)j_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta},\ \ f^{10}_{mnm'n'}(\theta,\varphi)=\exp(i\Delta_{m'm})j_n(x)v_n(x_1)\frac{dr(\theta,\varphi)}{d\theta}.
\end{gathered}$$

Итак, путем использования метода расширенных граничных условий получено решение задачи рассеяния для случая нерегулярной формы рассеивателя (эллипсоид).

Коэффициенты разложения рассеянного и падающего электромагнитных полей оказываются связанными линейными преобразованиями *T*-матрицы. Последняя зависит от ряда параметров (размер рассеивателя по отношению к длине волны, показатель преломления и т. п.), но она есть инвариант относительно направления распространения падающего излучения для выбранной системы координат.

Следует также оговорить актуальную сложность применения *T*-матричного метода для биологических сред, оптическая «мягкость» которых достаточно типична. Эта сложность связана (в оговоренных случаях) с плохой сходимостью рядов, им соответствующих, в расчетных формулах для элементов *T*-матрицы. Возможность сильно осциллирующего поведения подынтегрального выражения может также снижать точность. Более того, численное обращение матрицы будет плохо обусловленным для рассеивателей с нулевой (или малой) мнимой частью коэффициента преломления.

Следуя работам [22, 23], можно в значительной мере улучшить сходимость, если использовать так называемую LU-факторизацию, основанную на применении расширенного граничного условия. Графики, представленные на рис. 1, показывают справедливость этого утверждения.

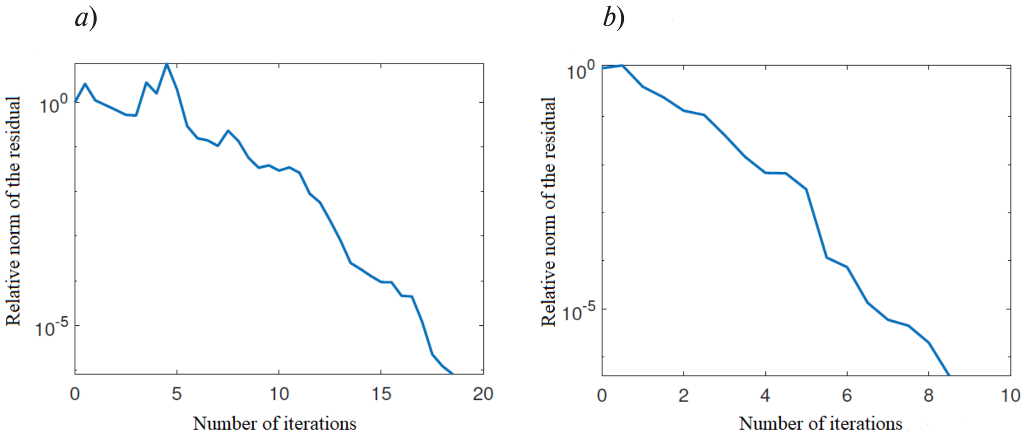


Рис. 1. Зависимости относительной нормы невязки от номера итерации для расстояний между частицами 1 мкм (*a*) и 2 мкм (*b*).

Получены с помощью метода бисопряженных градиентов с предобуславливанием (см. табл. 1)

Таблица 1

Параметры модельной среды, включающей 5 частиц

Расстояние между частицами, мкм	Коэффициент преломления для частицы		
	m_1	m_2	m_3, m_4, m_5
1	1,37	1,34	1,33
2	1,35	1,33	

Примечание. a = 18 мкм, c = 3 мкм для первых трех частиц, для остальных – a = c = 5 мкм, (a – значение длины полуосей сфероида вдоль осей x, y; c – вдоль оси z).

Многократное рассеяние на совокупностях несферических рассеивателей

Электромагнитные волны, падающие на поверхность j-го рассеивателя, будут формировать поле $\mathbf{E}_i(j)$, которое состоит из двух слагаемых: созданное первоначально падающими волнами и созданное рассеянием на совокупности частиц. Сумма слагаемых следует выражению

$$\mathbf{E}_i(j)=\mathbf{E}_0(j)+\sum_{i\neq j}\mathbf{E}_s(l,j). \tag{27}$$

Под знаком суммирования стоит совокупность полей, рассеянных на j-й частице; (l,j) предписывает переход из системы координат l в систему координат j.

Выпишем отдельно выражение для падающего поля:

$$\mathbf{E}_0=-\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left[p_{mn}^{j_0,j}\mathbf{N}_{mn}^{1}(kr)+q_{mn}^{j_0,j}\mathbf{M}_{mn}^{1}(kr)\frac{e^{im\varphi}}{kr}\right]. \tag{28}$$

Отметим, что рассматривается падение волн относительно центра каждой j-й частицы в ее системе координат (j-система).

Для данной плоской электромагнитной волны коэффициенты разложения принимают следующий вид [18]:

$$p_{mn}^{j_0,j}=4\pi(-1)^m i^n d_n\mathbf{C}_{mn}^{*}(\theta_{ink})\mathbf{E}_{ink}(\mathbf{k}_{ink},\mathbf{r}_{j_0,j})\exp(-im\varphi_{ink}),$$

$$q_{mn}^{j_0,j}=4\pi(-1)^m i^{n-1} d_n\mathbf{B}_{mn}^{*}(\theta_{ink})\mathbf{E}_{ink}(\mathbf{k}_{ink},\mathbf{r}_{j_0,j})\exp(-im\varphi_{inc}).$$

Комплексное сопряжение стандартно отмечено звездочкой, обозначение $\mathbf{E}_{ink}(\mathbf{k}_{ink},\mathbf{r}_{j_0,j})$ представляет вектор линейной поляризации.

Для поля, рассеянного частицами, справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{E}_s=-\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left[p_{mn}^{l,j}\mathbf{N}_{mn}^{1}+q_{mn}^{l,j}\mathbf{M}_{mn}^{1}\right], \tag{29}$$

где коэффициенты разложения имеют вид, представленный в статье [19].

Следующий этап состоит в построении бесконечной системы алгебраических уравнений на основе объединения выражений (27) – (29), учитывающих выражения (16) для каждой j-й частицы произвольной формы:

$$\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix}=T_{12}^{j}\left[\begin{pmatrix} p^{i,j} \\ q^{i,j} \end{pmatrix}+\sum_{l\neq j}\begin{pmatrix} A(l,j) & B(l,j) \\ B(l,j) & A(l,j) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^j \\ b^j \end{pmatrix}\right]. \tag{30}$$

В статье [19] определены соответствующие коэффициенты.

Для решения представленной системы мы остановились на методе редукции с последующим применением метода бисопряженных градиентов.

После нахождения коэффициентов системы (30) становится возможным записать и полное поле в дальней зоне:

$$E_{totalq}=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n} iE_{mn}\left[a_{mn}\mathbf{N}_{mn}^{3}+b_{mn}\mathbf{M}_{mn}^{3}\right], \tag{31}$$

$$a_{mn}=\sum_{j=1}^{L}\exp(-i\mathbf{k}_s,\mathbf{r}_j)a_{mn}^{j},\ \ b_{mn}=\sum_{j=1}^{L}\exp(-i\mathbf{k}_s,\mathbf{r}_j)b_{mn}^{j}. \tag{32}$$

Покомпонентная запись рассеянного поля имеет вид:

$$E_{s\theta}\sim\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-i)^n E_{mn}i\left[a_{mn}\tau_{mn}+b_{mn}\pi_{mn}\right]\frac{\exp(ikr)}{ikr}\exp(im\varphi), \tag{33}$$

$$E_{s\varphi}\sim\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-i)^n E_{mn}i\left[a_{mn}\pi_{mn}+b_{mn}\tau_{mn}\right]\frac{\exp(ikr)}{ikr}\exp(im\varphi), \tag{34}$$

где функции от угла следуют выражениям

$$\tau_{mn}=\frac{\partial}{\partial\theta}P_n^m(\cos\theta),\ \ \pi_{mn}=\frac{m}{\sin\theta}P_n^m(\cos\theta).$$

Знак тильды (~) здесь подразумевает использование асимптотического приближения.

Более того, поскольку мы считаем, что рассматриваются процессы рассеяния на достаточно больших расстояниях от частицы, где электрические векторы рассеянного и падающего полей можно считать параллельными, можно еще упростить выражения (33) и (34) (считаем, что в дальней зоне только θ-компонента ненулевая).

$$E_{s\theta} \sim E_0 \frac{\exp(ikr)}{-ikr} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_{mn}\tau_{mn} + b_{mn}\pi_{mn}). \tag{35}$$

$$E_{s\varphi} \sim E_0 \frac{\exp(ikr)}{-ikr} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_{mn}\pi_{mn} + b_{mn}\tau_{mn}), \tag{36}$$

$$\tau_n = \frac{\partial}{\partial\theta} P_n(\cos\theta), \ \ \pi_n = \frac{1}{\sin\theta} P_n(\cos\theta).$$

Моделирование отражения плоской волны от нетривиальной многослойной структуры

Рассмотрим нетривиальную слоистую структуру (под нетривиальностью подразумевается «волнистость» слоев), где каждый слой обладает собственным показателем преломления, и воспользуемся некоторыми результатами, полученными в статье [20].

Плоская p-поляризованная волна (проще будет аналогичный вариант s-поляризации) падает на изучаемую модель под углом θ. Наша задача – найти отраженное поле. Выпишем выражения для полей, сформированных световым излучением, прошедшим через указанные выше слои и отраженным от них, считая при этом, что фазы волн быстро осциллируют, а амплитуды медленно изменяются:

$$E_1 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{inc}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{1ref}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] A(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y), \tag{37}$$

$$\begin{aligned} E_2 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{2elap}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] B^{+}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y) + \\ + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3ref}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] B^{-}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y), \end{aligned} \tag{38}$$

$$\begin{aligned} E_3 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3elap}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] C^{+}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y) + \\ + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{3ref}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] C^{-}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y), \end{aligned} \tag{39}$$

$$\begin{aligned} E_4 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{4elap}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] D^{+}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y) + \\ + \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{5ref}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] D^{-}(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y) + E_{4scat\varphi}(\xi_1,\xi_2,\xi_3), \end{aligned} \tag{40}$$

$$E_5 = \exp\left[\frac{i}{\varepsilon}\tau_{5elap}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\right] E(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\varepsilon_x,\varepsilon_y). \tag{41}$$

По аналогии с нашей работой [20], мы последовательно нашли члены ряда для искомых амплитуд, а также выражение для гауссова пучка.

Функция распределения частиц, моделируемых эллипсоидами вращения

Определим параметры модельной среды, соответствующие нормальной коже человека (табл. 2).

Пусть падающая плоская волна распространяется в направлении оси *x* (малая ось для сплюснутого эллипсоида) и обладает поляризацией в направлении оси *z*.

Таблица 2

Принятые характеристики модельной среды [20]

Параметр	Обозначение	Значение параметра для слоя *i*		
		(*2*)	(*3*)	(*4*)
Толщина слоя, мкм	d_i	65	565	90
Набор параметров искажения	a_i	−0,0024	0,021	0,041
	b_i	0,0200	0,030	0,050
	c_i	0,010		
Коэффициент преломления (действительная часть)	n^0_i	1,50	1,40	1,35

Примечания. 1. Параметры искажения представлены формулой $H_i = c_i \sin(a_i x + b_i y)$. 2. Коэффициент преломления воздушной среды $n_1 = 1{,}000$; для *i*-го слоя модельной поглощающей среды с $n_i = n_i^0 + i\chi_i$ было принято $\chi_2 = \chi_3 = \chi_4 = \chi_5 = 10^{-5}$; $n_5^0 = 1{,}40$.

На рис. 2 представлены изображения сплюснутого (oblate) и вытянутого (prolate) эллипсоидов и показана используемая система координат, связанная с ними.

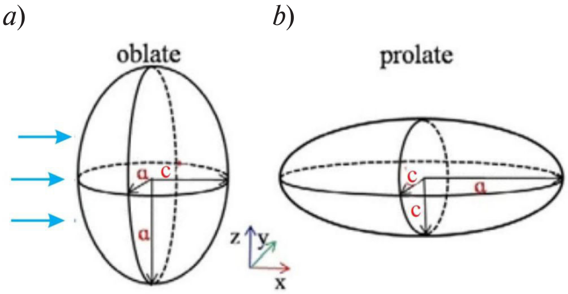


Рис. 2. Изображения сплюснутого (*a*) и вытянутого (*b*) эллипсоидов; *a*, *c* – длины их полуосей, направленных вдоль соответствующих осей координат. Голубые стрелки указывают направление падающих лазерных лучей

Модельная среда максимально приближена к реальным показателям нормальной кожи человека.

Рассматривать эритроцит как однородный рассеиватель нам позволяет ряд следующих, хорошо известных фактов: мембрана эритроцита тонка и не оказывает существенного влияния на процесс рассеяния лазерного излучения, а клеточные органеллы в структуру эритроцита не включены. Таким образом, наши расчеты выполнены для сплюснутого эллипсоида (рис. 3).

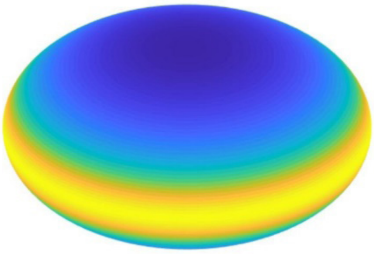


Рис. 3. Общий вид рассматриваемого сплюснутого эллипсоида размерами *a* = 18 мкм, *c* = 3 мкм

Математический подход, развитый нами, позволяет распознавать факт агрегирования частиц, а также определять их спектральные параметры для случая *in vivo*. Представленные далее иллюстрации (рис. 4 – 6) демонстрируют возможности программного комплекса, созданного нами на основе представленного теоретического подхода. Видно, что как численные параметры, так и формы кривых изменяются при варьировании расстояний между рассеивателями.

Полученные результаты указывают на разницу в размерах клеток, многообразие их внутренних структур, влияние интерференции на картину волновых полей, рассеянных соседними частицами.

Таким образом, разработанный метод создает новые возможности, позволяя учитывать и эффекты кооперативного взаимодействия частиц в случае более плотной упаковки эритроцитов.

Следующим этапом исследований выступает решение обратной задачи: найти распределение эритроцитов (считая их сфероидами) по соотношению сторон сфероида ($\rho = a/c$), основываясь на известной интенсивности рассеяния лазерного излучения (измеренной с некой погрешностью) на агрегированной совокупности частиц, находящихся в слое (случай *in vivo*).

Подобные задачи описываются линейными интегральными уравнениями Фредгольма I рода. Они имеют вид

$$\boldsymbol{A}u \equiv \int_{\rho\min}^{\rho\max} I_{scat(\theta)}(\rho,\lambda)u(\rho)d\rho = f(\lambda), \qquad (42)$$

где $\boldsymbol{A}$– интегральный оператор, $I_{scat(\theta)}(\rho, \lambda)$ – ядро интегрального уравнения, $u(\rho)$ – искомое распределение клеток по размерам, $f(\lambda) = I_{blood}(\theta, \lambda)$ –интенсивность рассеяния.

Ядро $I_{scat(\theta)}(\rho, \lambda)$ определяется как интенсивность света, рассеянного в направлении угла θ (угол выбирается в эксперименте) на несферической частице (см. формулу (35)). Будем предполагать, что это ядро есть функция, непрерывная в прямоугольнике $\Omega = ([c,d]\times[a,b])$, и $f(\lambda)\in L_{[c,d]}$ ($a\equiv\rho_{\min}$, $b\equiv\rho_{\max}$, $c\equiv\lambda_{\min}$, $d\equiv\lambda_{\max}$).

Обращение интегрального оператора $\boldsymbol{A}$ для обратной задачи (см. уравнение (42)) неустойчиво, поэтому для численного решения целесообразно использовать метод регуляризации Тихонова [24, 25].

Автоматическое определение параметра регуляризации по заданным погрешностям ядра и «измеренным» данным возможно в рамках разработанного нами программного комплекса (в этот комплекс входят методы относительной невязки, обобщенный принцип невязки (ОПН), метод L-кривой и критерий квазиоптимальности).

Таким образом, мы предлагаем выбирать параметр регуляризации по нескольким критериям. В задаче с известным модельным решением это позволяет найти диапазон наилучших значений параметра α. Оказалось, что принцип невязки и ОПН дали одинаковое значение параметра и при их использовании в решении интегрального уравнения (42) восстановился профиль, близкий к модельному.

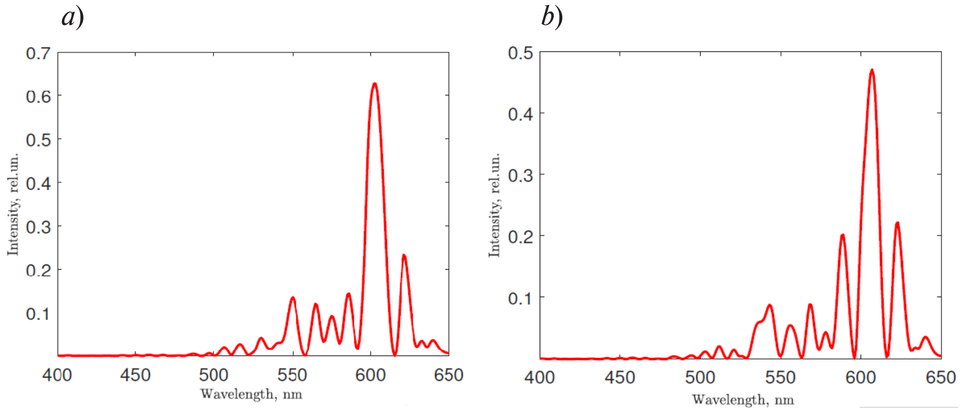


Рис. 4. Функциональные зависимости интенсивности рассеянного света от его длины волны на совокупностях частиц, дислоцированных в слое; расстояния между частицами 1 мкм (*a*) и 2 мкм (*b*) (см. табл. 1)

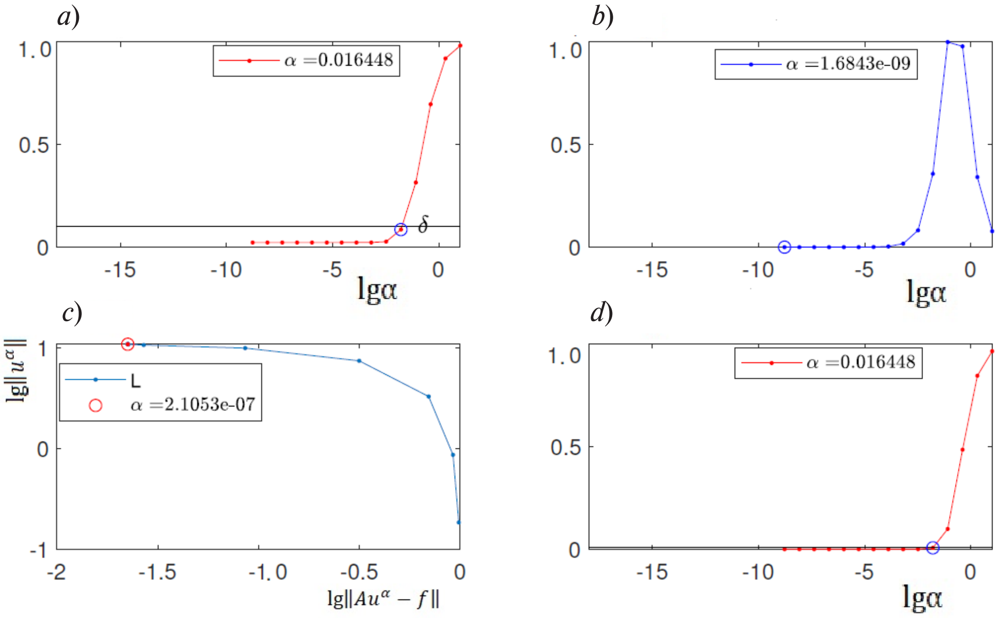


Рис. 5. Результаты автоматического определения параметра регуляризации α по заданным погрешностям ядра и «измеренным» данным с использованием разных критериев: невязки (*a*), квазиоптимальности (*b*), *L*-кривой (*c*) и обобщенному принципу невязки (*d*) для бимодального распределения (см. рис. 7,*a*)

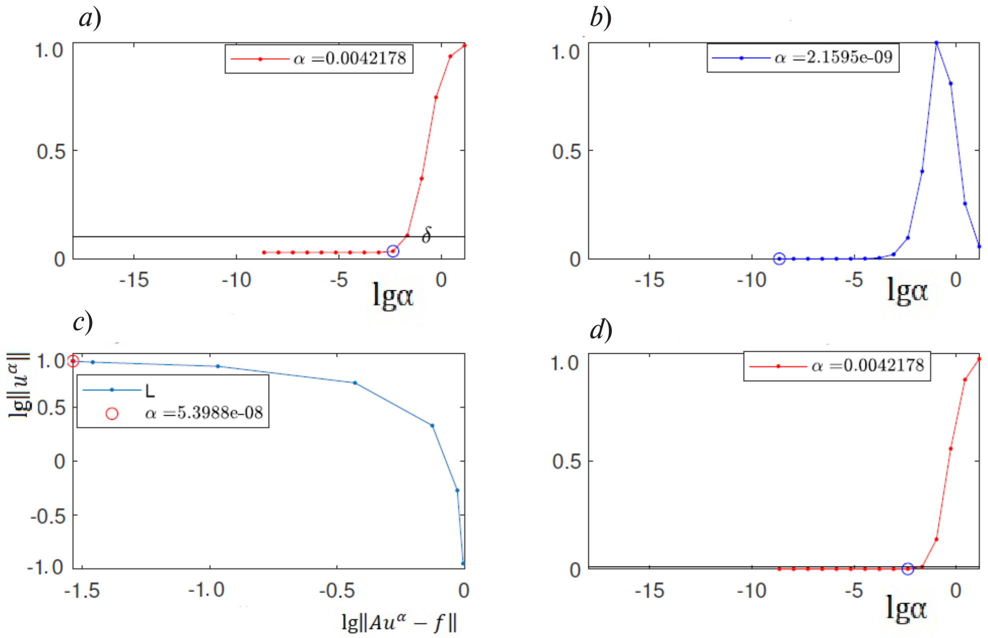


Рис. 6. Результаты, аналогичные представленным на рис. 5, но для нормального распределения (см. рис. 7,*b*)

На рис. 7,*a* представлено сравнение двух кривых. Непрерывная черная соответствует асимметричному бимодальному распределению по размерам частиц, которое задано заранее функцией, определенной в статье [26]. Заданное распределение моделирует наличие фракций нормоцитов и макроцитов. Точечная цветная кривая отвечает нашему численному решению задачи и, как можно видеть, демонстрирует, что оба пика распределения по размерам восстановлены вполне удовлетворительно. Аналогичная непрерывная кривая на рис. 7,*b* также соответствует заранее заданному распределению по размерам, но нормальному (см. статью [26]). В результате нашего численного решения задачи (точечная цветная кривая), при котором уровень шума в правой части уравнения (42) принят равным 5 %, также получено вполне удовлетворительное согласие с заданной функцией. Итак, профили распределения частиц по размерам восстановлены с высокой точностью.

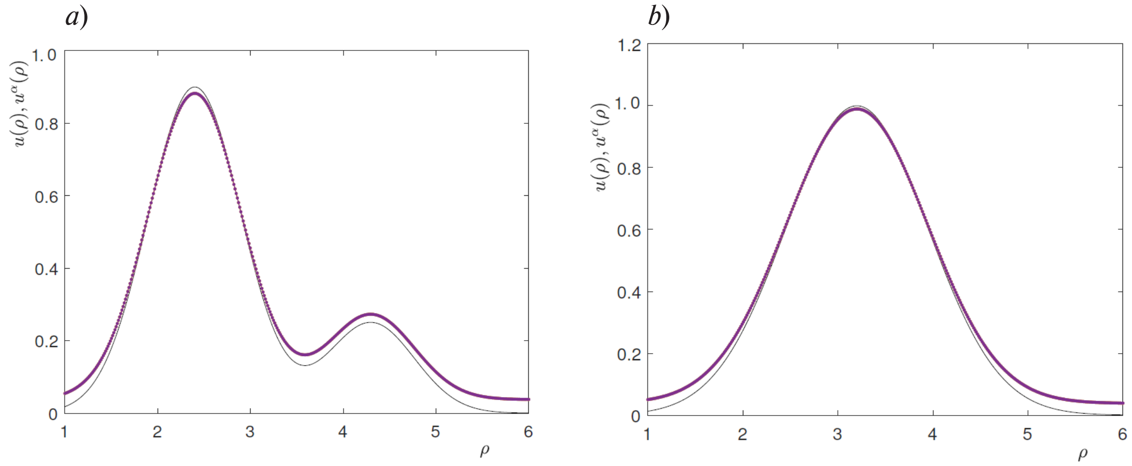


Рис. 7. Бимодальное (*a*) и нормальное (*b*) распределения по размерам для сфероидальных частиц при двух значениях расстояния между рассеивателями: 1 мкм (*a*) и 2 мкм (*b*).

Представлено сравнение графиков функций из статьи [26] (непрерывные линии) и результатов нашего численного решения (точечные линии)

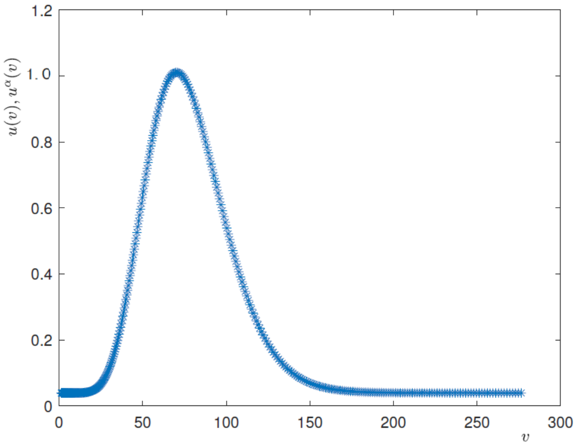


Рис. 8. Функция нормального распределения частиц по объему (кривая Прайса – Джонса), полученная для расстояния 2 мкм между рассеивателями

Анализ графиков на рис. 7 также позволяет заключить, что учет несферичности частиц точно восстанавливает кривую Прайса – Джонса (рис. 8), описывающую типичное распределение по объему форменных элементов крови человека.

Эритроцитные индексы

В данном разделе рассмотрим численную оценку эритроцитных индексов (стандартно используются в клинической практике), в частности средний объем эритроцита (*англ.* Mean Corpuscular Volume (MCV)) и степени разброса эритроцитов по объему. К ним относятся отклонения относительной ширины распределения эритроцитов по объему (*англ.* Red Cell Distribution Width (RDW)) от среднего значения (*англ.* Coefficient of Variation (CV)) и от стандарта (*англ.* Standard Deviation (SD)).

Другими словами, RDW-CV показывает в процентах отклонение объема эритроцита от среднего, а RDW-SD есть разница между самым крупным и самым мелким эритроцитом (измеряется в фемтолитрах, как и MCV).

Определим сначала объем тела, образованного вращением вокруг оси фигуры:

$$V_{rot} = 4\pi\int_0^1 xy(x)dx, \tag{43}$$

где у(x) представляет семейство кривых Персея [27] –

$$y(x) = c\sqrt{a^2 - (\sqrt{x^2 - p^2} - d^2)^2}; \tag{44}$$

здесь представлены параметры фигуры: a, b – полуоси эллипса, $c = a / b$ ($a = 0{,}150662$, $c = 1{,}659376$); d – расстояние от начала координат до центра эллипса ($d = 1{,}768398$); p – расстояние от оси тора до секущей плоскости ($p = 1{,}637922$). Выражение (44) определяет семейства кривых Персея. Они являются линиями пересечения поверхности тора плоскостями, параллельными его оси, и представляют собой алгебраические линии 4-го порядка.

Для этой фигуры объем вращения составляет

$$V_{rot} = 4\pi\int_0^1 xc\sqrt{a^2 - (\sqrt{x^2 + p^2} - d)^2}dx = 1{,}2799.$$

Если принять, что диаметр эритроцита человека равен в среднем 7,55 мкм, то связь объема с радиусом эритроцита будет иметь вид $V_{\text{MCV}} = V_{rot}R^3$ и средний объем эритроцита составит $V_{\text{MCV}} = 1{,}2799 \cdot 68{,}8536$ мкм^3.

Уравнение вида (44) запишем в сферической системе координат:

$$r^4\alpha_1 - 2r^2\alpha_2 - \beta_2 = 0,$$

и соответствующее решение этого биквадратного уравнения имеет вид

$$r(\theta, \varphi) = \frac{\sqrt{\alpha_1(-\alpha_2 + \sqrt{\alpha_1\beta_2 + \alpha_2^2})}}{\alpha_1}, \tag{45}$$

где $\alpha_1 = \gamma_1 \sin^2\theta,\ \alpha_2 = \beta_1 \sin\theta,\ \beta_2 = \dfrac{2db^2}{a^2}p - \gamma_2;$

здесь

$$\gamma_1 = \sin^2\varphi + \frac{b^2}{a^2}\cos^2\varphi,\ \gamma_2 = b^2(1 + \frac{p}{a^2}) - d^2,\ \beta_1 = \gamma_1\gamma_2 - \frac{db^2}{a^2}\cos^2\varphi.$$

Решение обратной задачи дает возможность найти функцию распределения по объему (см. рис. 8) с учетом уравнения поверхности (45).

Заметим, что аналогичные результаты были получены в статье [29].

В таком случае можно вычислить показатель гетерогенности размера эритроцита на основе полученного теоретического распределения по объему.

В медицинской практике показатель RDW-SD представляет собой результат прямого измерения ширины эритроцитарной кривой на двадцатипроцентном уровне (при высоте кривой, принятой за 100 %) [28].

Например, RDW-SD = 118 – 36 = 82 фл. И тогда значения, находящиеся в пределах 80 – 100 фл, характеризуют эритроцит как нормоцит, ниже 80 фл – микроцит, а выше 100 фл – макроцит.

Следует отметить, что показатель RDW-SD более чувствителен к появлению некоторого количества микро- и макроцитов в популяции эритроцитов, поскольку его измеряют на нижней части кривой распределения эритроцитов по объему. При ретикулоцитозе (превышение нормы ретикулоцитов (предшественники эритроцитов) в процессе кроветворения) этот показатель будет меняться быстрее, поскольку будет наблюдаться некое уширение эритроцитарной кривой.

Результаты и выводы

Основная задача представленного исследования состояла в выработке и уточнении электродинамической модели взаимодействия маломощного лазерного излучения с дисперсной средой, включающей элементы нерегулярной формы (эллипсоид), которые представляют собой модели клеток крови (эритроцитов), расположенные в среде со слоистым строением (случай *in vivo*).

Сформулируем основные итоги представленного материала.

1. Изложены разработанные аналитические методы расчета светорассеивающих характеристик частиц, расположенных в слоистой среде. Предполагается, что эти частицы произвольно ориентированы и имеют неправильную форму (несферические).

2. Реализованы меры, оптимизирующие сходимость процессов при использовании метода расширенных граничных условий; это позволило увеличить возможности применения T-матричного метода.

3. Разработанная математическая модель анализа биологических процессов по рассчитываемым оптическим характеристикам получила воплощение в новом программном комплексе.

4. Разработанный подход к проблеме сделал возможным корректно восстанавливать традиционно применяемый показатель распределения форменных элементов крови (RDW-SD) для случая *in vivo*, причем с учетом отношения сторон и особенностей строения биологического агрегированного образования.

5. Найдена возможность теоретически предсказывать количество аномальных по размеру эритроцитов в биоматериале, используя разработанную модель, на основе обычного измерения ширины распределения эритроцитов по размерам. Например, в случае присутствия микро- и макроцитов, можно диагностировать степень аницитоза (изменение эритроцитов по размеру) поскольку ширина распределения будет выше референсного значения, а полученные кривые распределения эритроцитов по объему наглядно указывают различие клеток по размеру.

Таким образом, индекс RDW – это содержательный и удобный диагностический лабораторный маркер.

Полученные результаты, представленные в статье, служат основой предлагаемого нового метода экспресс-анализа цельной крови. Согласно этому методу, необходимо находить распределения форменных элементов крови по характерным индексам, индекса RDW, а также геометрические характеристики эритроцитов, относящиеся к их объему и форме, для случая *in vivo*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тучин В. В.** Оптическая биомедицинская диагностика. В 2 тт. Т. 1. М.: Ай Пи Ар Медиа, 2021. 549 с.

2. **Eremina E., Eremin Y., Wriedt T.** Analysis of light scattering by erythrocyte based on the discrete sources method // Optics Communications. 2005. Vol. 244. No. 1–6. Pp. 15–23.

3. **Eremina E., Hellmers J., Eremin Y., Wriedt T.** Different shape models for erythrocyte: Light scattering analysis based on the discrete sources method // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2006. Vol. 102. No. 1. Pp. 3–10.

4. **Eremina E., Wriedt T.** Light scattering analysis by a particle of extreme shape via discrete soused method // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2004. Vol. 89. No. 1–4. Pp. 67–77.

5. **Mishchenko M. I., Wiscomber W. J., Hovenier J. W., Travis L. D.** Overview of scattering by nonspherical particles // Mishchenko M. I., Hovenier J. W., Travis L. D. (Eds.). Light scattering by nonspherical particles: Theory, measurements and applications. Cambridge, Massachusetts, USA: Academic Press, 1999. Pp. 29–60.

6. **Latimer P.** Light scattering by ellipsoids // Journal of Colloid and Interface Science. 1975. Vol. 53. No. 1. Pp. 102–109.

7. **Cai Q., Liou K.-N.** Polarized light scattering by hexagonal ice crystals: Theory // Applied Optics. 1982. Vol. 21. No. 19. Pp. 3569–3580.

8. **Hammer M., Schweitzer D., Michel B., Thamm E., Kolb A.** Single scattering by red blood cells // Applied Optics. 1998. Vol. 37. No. 31. Pp. 7410–7418.

9. **Ван де Хюлст Г.** Рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. литры, 1961. 536 с.

10. **Шатилов А. В.** О рассеянии света диэлектрическими эллипсоидами, сравнимыми с длиной волны. 1. Общее выражение для индикатрисы рассеяния эллипсоидальной частицы // Оптика и спектроскопия. 1960. Т. 9. № 1. С. 86–91.

11. **Ньютон Р.** Теория рассеяния волн и частиц. Пер. с англ. М.: Мир, 1969. 600 с.

12. **Klett J. D., Sutherland R. A.** Approximate methods for modeling the scattering properties of nonspherical particles: Evaluation of the Wentzel – Kramers – Brillouin method // Applied Optics. 1992. Vol. 31. No. 3. Pp. 373–386.

13. **Erma V. A.** An exact solution for the scattering of electromagnetic waves from bodies of arbitrary shape: III. Obstacles with arbitrary electromagnetic properties // Physical Review. 1969. Vol. 179. No. 5. Pp. 1238–1246.

14. **Waterman P. C.** Matrix formulation of electromagnetic scattering // Proceedings of the IEEE. 1969. Vol. 53. No. 8. Pp. 805–812.

15. **Waterman P. C.** Symmetry, unitarity and geometry in electromagnetic scattering // Physical Review D. 1971. Vol. 3. No. 4. Pp. 825–839.

16. **Steinke J. M., Shepherd A. P.** Comparison of Mie theory and light scattering of red blood cells // Applied Optics. 1988. Vol. 27. No. 19. Pp. 4027–4033.

17. **Yaroslavsky A. N., Goldbach T., Schwarzmaier H.** Influence of the scattering phase function approximation on the optical properties of blood determined from the integrating sphere measurements // Journal of Biomedical Optics. 1999. Vol. 4. No. 1. Pp. 47–53.

18. **Tsang L., Kong J. A., Shin R. T.** Theory of microwave remote sensing. New York: Willey Interscience, 1985. 632 p.

19. **Куликов К. Г., Радин А. М.** Исследование дисперсии и спектра поглощения совокупности сферических частиц в полости оптического резонатора и новые возможности прогноза оптических характеристик биологических сред методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии // Оптика и спектроскопия. 2002. Т. 92. № 2. С. 228–236.

20. **Головицкий А. П., Концевая В. Г., Куликов К. Г.** Электродинамическая модель определения функции распределения частиц по размерам для клеток крови (случай *in vivo*) // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 1. С. 97–110.

21. **Doicu A., Wriedt T., Eremin Y. A.** Light scattering by systems of particles. Null-field method with discrete sources: Theory and programs. Berlin, New York: Springer, 2006. 322 p.

22. **Mishchenko M. I., Travis L. D.** T-matrix computations of light scattering by large spheroidal particles // Optics Communications. 1994. Vol. 109. No. 1–2. Pp. 16–21.

23. **Mishchenko M. I., Travis L. D.** Capabilities limitations of a current FORTRAN implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers // Journal of Quantative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1998. Vol. 60. No. 3. Pp. 309–324.

24. **Тихонов А. Н., Арсенин В. А.** Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.

25. **Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г.** Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.

26. **Устинов В. Д.** Об обратных задачах восстановления распределения эритроцитов по размерам в лазерной дифрактометрии // Математическое моделирование. 2017. Т. 29. № 3. С. 51–62.

27. **Зуб В. В., Кириллов В. Х., Кузаконь В. М.** Геометрия эритроцита // Scientific Works. 2015. No. 48. Pp. 182–186.

28. **Caporal F. A., Comar S. R.** Evaluation of RCW-CV, RDW-SD, and MATH-1SD for the detection of erythrocyte anisocytosis observed by optical microscopy // Brazilian Journal of Pathology and Laboratory Medicine. 2013. Vol. 49. No. 5. Pp. 324–331.

29. **Дубровский В. А., Торбин С. О., Забенков И. В.** Определение индивидуальных средних характеристик эритроцитов нативной крови методом статистической цифровой спектральной микроскопии // Оптика и спектроскопия. 2022. Т. 130. № 6. С. 894–905.

REFERENCES

1. **Tuchin V. V.,** Handbook of optical biomedical diagnostics, 2nd Edition, Vol. 1: Light-tissue interaction, SPIE Press, Bellingham, WA, USA, 2016.

2. **Eremina E., Eremin Y., Wriedt T.,** Analysis of light scattering by erythrocyte based on the discrete sources method, Opt. Commun. 244 (1–6) (2005) 15–23.

3. **Eremina E., Hellmers J., Eremin Y., Wriedt T.,** Different shape models for erythrocyte: Light scattering analysis based on the discrete sources method, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 102 (1) (2006) 3–10.

4. **Eremina E., Wriedt T.,** Light scattering analysis by a particle of extreme shape via discrete soused method, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 89 (1–4) (2004) 67–77.

5. **Mishchenko M. I., Wiscomber W. J., Hovenier J. W., Travis L. D.,** Overview of scattering by nonspherical particles, In book: Mishchenko M. I., Hovenier J. W., Travis L. D. (Eds.), Light scattering by nonspherical particles: Theory, measurements and applications, Academic Press, Cambridge, Massachusetts, USA (1999) 29–60.

6. **Latimer P.,** Light scattering by ellipsoids, J. Colloid Interface Sci. 53 (1) (1975) 102–109.

7. **Cai Q., Liou K.-N.,** Polarized light scattering by hexagonal ice crystals: Theory; Appl. Opt. 21 (19) (1982) 3569–3580.

8. **Hammer M., Schweitzer D., Michel B., et al.,** Single scattering by red blood cells, Appl. Opt. 37 (31) (1998) 7410–7418.

9. **Van de Hulst H. C.,** Light scattering by small particles, John Willey & Sons Inc., New York, 1957.

10. **Shatilov A. V.,** O rasseyanii sveta dielektricheskimi ellipsoidami, sravnimymi s dlinoyvolny. 1. Obshchee vyrazheniye dlya indikatrisy rasseyaniya ellipsoidalnoy chastitsy [About light scattering by dielectric ellipsoids comparable to the wavelength. 1. General expression for the scattering indicatrix of an ellipsoidal particle], Optika i Spektroskopiya. 9 (1) (1960) 86–91 (in Russian).

11. **Newton R. G.,** Scattering theory of waves and particles, Second Edition (Dover Books on Physics), Dover Publications, New York, 2013.

12. **Klett J. D., Sutherland R. A.,** Approximate methods for modeling the scattering properties of nonspherical particles: Evaluation of the Wentzel–Kramers–Brillouin method, Appl. Opt. 31 (3) (1992) 373–386.

13. **Erma V. A.,** An exact solution for the scattering of electromagnetic waves from bodies of arbitrary shape: III. Obstacles with arbitrary electromagnetic properties, Phys. Rev. 179 (5) (1969) 1238–1246.

14. **Waterman P. C.,** Matrix formulation of electromagnetic scattering, Proc. IEEE. 53 (8) (1969) 805–812.

15. **Waterman P. C.,** Symmetry, unitarity and geometry in electromagnetic scattering, Phys. Rev. D. 3 (4) (1971) 825–839.

16. **Steinke J. M., Shepherd A. P.,** Comparison of Mie theory and light scattering of red blood cells, Appl. Opt. 27 (19) (1988) 4027–4033.

17. **Yaroslavsky A. N., Goldbach T., Schwarzmaier H.,** Influence of the scattering phase function approximation on the optical properties of blood determined from the integrating sphere measurements, J. Biomed. Opt. 4 (1) (1999) 47–53.

18. **Tsang L., Kong J. A., Shin R. T.,** Theory of microwave remote sensing, Willey Interscience, New York, 1985.

19. **Kulikov K. G., Radin A. M.,** Study of dispersion and absorption of an ensemble of spherical particles inside an optical cavity and new possibilities of predicting the optical characteristics of biological media by intracavity spectroscopy, Opt. Spectrosc. 92 (2) (2002) 199–206.

20. **Golovitskii A. P., Kontsevaya V. G., Kulikov K. G.,** An electrodynamic model for determining the distribution function of particles by size for blood cells *in vivo*, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1) (2023) 97–110 (in Russian).

21. **Doicu A., Wriedt T., Eremin Y. A.,** Light scattering by systems of particles. Null-field method with discrete sources: Theory and programs, Springer, Berlin, New York, 2006.

22. **Mishchenko M. I., Travis L. D.,** T-matrix computations of light scattering by large spheroidal particles, Opt. Commun. 109 (1–2) (1994) 16–21.

23. **Mishchenko M. I., Travis L. D.,** Capabilities limitations of a current FORTRAN implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 60 (3) (1998) 309–324.

24. **Tikhonov A. N., Arsenin V. A.,** Solution of ill-posed problems, Winston, USA, 1977.

25. **Tikhonov A. N., Goncharsky A. V., Stepanov V. V., Yagola A. G.,** Numerical methods for the solution of ill-posed problems, Book Series: Mathematics and its Applications, Vol. 328, Springer Dordrecht, Netherlands, 1995.

26. **Ustinov V. D.,** On inverse reconstruction problems of the erythrocyte size distribution in laser diffractometry, Math. Models Comput. Simul. 9 (5) (2017) 561–569.

27. **Zub V. V., Kirillov V. Kh., Kuzakon V. M.,** Geometriya eritrotsita [Erythrocyte geometry], Sci. Works. (48) (2015) 182–186 (in Russian).

28. **Caporal F. A., Comar S. R.,** Evaluation of RCW-CV, RDW-SD, and MATH-1SD for the detection of erythrocyte anisocytosis observed by optical microscopy, J. Bras. Pathol. Med. Lab. 49 (5) (2013) 324–331.

29. **Doubrovski V. A., Torbin S. O., Zabenkov I. V.,** Determination of individual and average characteristics of native blood erythrocytes by the static spectral digital microscopy method, Opt. Spectrosc. 130 (6) (2022) 709–719.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexandergolovitski@yahoo.com
ORCID: 0000-0003-4292-0959

КОНЦЕВАЯ Вера Геннадьевна – *старший преподаватель кафедры математики и теории игр Псковского государственного университета, г. Псков, инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

180000, Россия, г. Псков, пл. Ленина, 2
nkoncevoi@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1434-5056

КУЛИКОВ Кирилл Геннадьевич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы биомедицинских технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kulikov.kirill.g@gmail.com
ORCID: 0000-0002-4610-7394

КОШЛАН Татьяна Викторовна – *научный сотрудник департамента компьютерных наук Университета имени Бен-Гуриона.*

Беер-Шева, Израиль
Koshlan.tetiana@gmail.com
ORCID: 0000-0002-0238-2909

THE AUTHORS

GOLOVITSKII Alexander P.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexandergolovitski@yahoo.com
ORCID: 0000-0003-4292-0959

KONTSEVAYA Vera G.
Pskov State University
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
2 Lenin Sq., Pskov, 180000, Russia
nkoncevoi@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1434-5056

KULIKOV Kirill G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kulikov.kirill.g@gmail.com
ORCID: 0000-0002-4610-7394

KOSHLAN Tatiana V.
Ben-Gurion University of Negel
P.O.B. 653, Beer Sheva 84105, Israel
Koshlan.tetiana@gmail.com
ORCID: 0000-0002-0238-2909

Статья поступила в редакцию 12.09.2023. Одобрена после рецензирования 05.10.2023. Принята 05.10.2023.
Received 12.09.2023. Approved after reviewing 05.10.2023. Accepted 05.10.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Ядерная физика

Научная статья
УДК 539.12
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16414

ГЕНЕРАТОР ГЛУБОКОНЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЛЕПТОНОВ НА ПРОТОНЕ НА ОСНОВЕ ГЕНЕРАТИВНО-СОСТЯЗАТЕЛЬНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

А. А. Лобанов ✉, **Я. А. Бердников**

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

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Аннотация. В работе рассмотрено применение генеративно-состязательной сети (ГСС) для создания генератора глубоконеупругого лептон-протонного рассеяния. Отмечена сложность эффективного обучения генератора на основе ГСС, которая связана с использованием сложных схем распределения физических характеристик (энергий, компонентов импульсов и т. п.) частиц в процессе глубоконеупругого лептон-протонного рассеяния. Показано, что ГСС позволяет точно воспроизводить распределения физических характеристик лептона в конечном состоянии.

Ключевые слова: инклюзивное глубоконеупругое рассеяние, нейронная сеть, генеративно-состязательная сеть, лептон-протонное рассеяние

Для цитирования: Лобанов А. А., Бердников Я. А. Генератор глубоконеупругого рассеяния лептонов на протоне на основе генеративно-состязательной нейронной сети // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 181–188. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16414

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16414

A GENERATOR OF DEEP INELASTIC LEPTON-PROTON SCATTERING BASED ON THE GENERATIVE-ADVERSARIAL NETWORK (GAN)

A. A. Lobanov ✉, **Ya. A. Berdnikov**

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

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Abstract. The paper considers the application of a Generative Adversarial Network (GAN) for the development of a generator of deep inelastic lepton-proton scattering. The difficulty of effective training of the generator based on GAN is noted. It is associated with the use of complex schemes of distributions of physical properties (energies, momentum components, etc.) of particles in the process of deeply inelastic lepton-proton scattering. It is shown that the GAN makes it possible to faithfully reproduce the distributions of lepton physical properties in the final state at different initial energies of the center of mass in the range between 20 and 100 GeV.

Keywords: inclusive deep inelastic scattering, neural network, generative adversarial network, lepton-proton scattering

For citation: Lobanov A. A., Berdnikov Ya. A., A generator of deep inelastic lepton-proton scattering based on the Generative-Adversarial Network (GAN), St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 181–188. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16414

Введение

Обработка и анализ результатов экспериментальных исследований глубоконеупругого лептон-протонного рассеяния требует привлечения моделирования как самого процесса взаимодействия частиц, так и функционирования детекторных комплексов; при этом наиболее удобен метод Монте-Карло. Проблема заключается в том, что моделирование включает сложные физические модели, расчет которых требует больших вычислительных и временных затрат.

Альтернативой может служить использование методов машинного обучения для построения генераторов событий. Преимуществом указанных методов можно считать возможность их обучения на разнородных данных, в качестве которых могут быть как экспериментальные результаты, так и данные, полученные путем моделирования всего рассматриваемого процесса (например, инклюзивного глубоконеупругого рассеяния). В итоге можно создать генератор событий, который способен быстро и с минимальными вычислительными затратами получать необходимые данные.

В настоящей работе рассмотрена одна из таких моделей машинного обучения – генеративно-состязательная сеть (ГСС). [1].

Преимуществом рассмотренной модели является ее возможность воспроизводить с высокой точностью данные (называемые далее эталонными), на которых она обучалась.

Модель ГСС включает две нейронные сети: генератор и дискриминатор. Задача первой состоит в генерации некоторых величин, например характеристик частиц. Задача второй сети – выделить отличия величин, полученных генератором, от эталонных значений.

Стараясь отличать эталонные значения от полученных генератором, дискриминатор таким образом корректирует генератор. С каждой новой итерацией обучения генератор все лучше справляется с генерацией величин, что, в свою очередь, корректирует работу дискриминатора [1].

Несмотря на успешное использование метода ГСС в различных приложениях (например, он позволяет генерировать фотографии и видео, неотличимые от реальных [2, 3]), этот метод не лишен некоторых недостатков, связанных с усложнениями в процессе обучения модели.

Эти усложнения проявляются вследствие сильной зависимости от параметров модели. В результате такой зависимости часто возникают следующие неудобства:

неустойчивости при обучении,
несходимости,
осцилляции параметров,
переобучение моделей.

Для решения перечисленных проблем существует множество подходов, например, представленные в работе [4].

Для настоящего исследования использован подход, предложенный в работе [5], который подробно описан ниже в разделе «Методика исследования».

Применение ГСС в области физики высоких энергий и физики элементарных частиц создает новые затруднения. Самым важным из них является множество строгих ограничений, продиктованных законами сохранения. В результате не любой результат генерации можно признать пригодным.

Важна и точность предсказания; в противном случае возможны нарушения взаимосвязей между производными величинами, что также недопустимо. Подобные проблемы, например, описаны в работе [6].

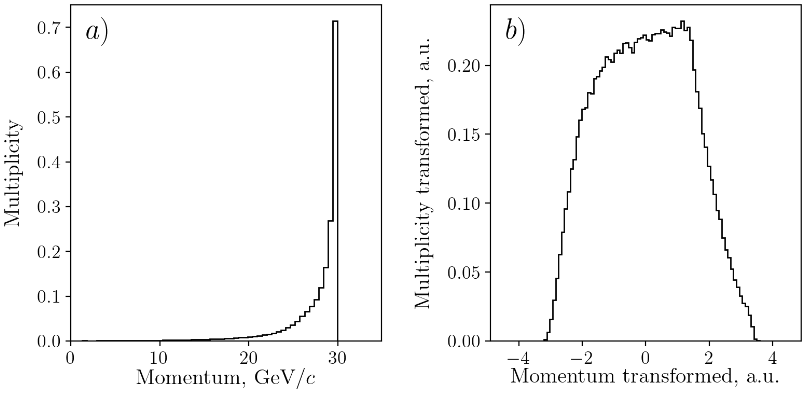


Рис. 1. Графики распределения компоненты импульса p_z конечного лептона (*a*) и преобразованной величины $T(p_z)$ (*b*).
Начальная энергия электрона E_0 = 30 ГэВ

Законы сохранения могут приводить к существенным нерегулярностям в распределениях физических величин (например, угловых, импульсных, энергетических и т. п.), характеризующих взаимодействие частиц. Примером может служить распределение p_z-компоненты импульса конечного лептона (рис. 1,*a*). Под множественностью (Multiplicity) понимается (на рис. 1 и далее) число отсчетов бине, нормированное на общее число событий, т. е. это безразмерная величина. На рис. 1,*a* видно, что у распределения есть «острый» край, связанный с законами сохранения энергии-импульса: энергия (импульс) в конечном состоянии не может превышать уровень энергии (импульса) в начальном состоянии. Существование такой нерегулярности плохо сказывается на обучении ГСС, что показано в работе [6].

Для решения проблем, связанных с нерегулярностями в распределении величины по некоторому физическому параметру, в работе [7] была предложена генерация не самих величин, а их преобразованных «двойников», причем измененных таким образом, чтобы новое распределение становились более гладким.

Для величины p_z-компоненты импульса конечного лептона в данной работе использовано следующее преобразование [7]:

$$T(p_z) = \log\left[(E_0 - p_z)/(1\ \mathrm{GeV}/c)\right].$$

В результате получено более гладкое распределение (см. рис. 1,*b*).

Аналогичное преобразование применялось для величины полной энергии рассеянного лептона E_l:

$$T(E_l) = \log\left[(E_0 - E_l)/(1\ \mathrm{GeV}/c)\right].$$

Методика исследования

Поскольку в данной работе рассматривается инклюзивное рассеяние заряженного лептона (e^+, e^-, μ^+, μ^-) на протоне, рассеянный лептон характеризуется 4-импульсом в системе центра масс лептона и протона:

$$p_l = \left(E_l, \mathbf{p}\right),$$

где **p** – трехмерный вектор импульса лептона, задаваемый компонентами p_x, p_y, p_z; E_l – полная энергия рассеянного лептона.

В качестве дополнительных параметров выступают полная энергия E_0 налетающего лептона в системе центра масс лептон-протон и тип лептона (e^+ либо e^- или μ^+ либо μ^-). Данные параметры позволяют ГСС предсказывать конечное состояние различных лептонов при разных рассмотренных начальных энергиях.

Энергия E_0 определяется как

$$E_0 \approx \sqrt{s_{lN}}/2,$$

где $\sqrt{s_{lN}}$ – начальная энергия в системе центра масс лептон-протон.

Для обучения были рассмотрены начальные энергии E_0 = 10, 20, 30, 40, 50 ГэВ.

Для получения конечных состояний лептонов использовалась программа PYTHIA8 [8]. Было сгенерировано по 100 тыс. событий при начальных энергиях $\sqrt{s_{lN}}$ = 20, 40, 60, 80 и 100 ГэВ для каждого типа лептона: (e^+, e^-, μ^+, μ^-). В каждом событии фиксировались значения 4-импульса конечного лептона (мы будем их называть эталонными).

Использование величин $T(p_z)$ и $T(E_l)$ (мы будем их называть преобразованными) позволяет генератору избежать предсказания нефизических значений, а дискриминатору легче отличать эталонные данные от сгенерированных.

Для повышения точности дискриминатора ему на вход передаются величины

$$p_z,\ E_l,\ p_T = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}, \varphi = \arctan\left(p_z/p_T\right), \theta = \arctan\left(p_y/p_x\right)$$

(эти величины мы будем называть дополнительными).

На вход генератора поступает 128-мерный вектор шума (вектор значений, полученных из распределения Гаусса со средним, равным 0, и дисперсией, равной 1), энергия E_0 и тип лептона. Сеть генератора состоит из 4 скрытых слоев по 512 нейронов с функцией активации “Leaky ReLU” и показателем 0,2 [9]. Выходной слой состоит из 4 нейронов с линейной функцией активации. На выходе получаем четыре основных предсказываемых величины: p_x, p_y, $T(p_z)$ и $T(E_l)$. Помимо этих, модель включает в себя предсказание дополнительных величин: p_z, E_l, p_T, φ, θ, полученных на основе предсказываемых. Основные и дополнительные величины далее передаются на вход дискриминатора.

Сеть дискриминатора представляет собой 4 скрытых слоя по 512 нейронов с функцией активации “Leaky ReLU” и показателем 0,2 [9]. Для каждого из слоев применяется так называемый “dropout layer” с коэффициентом 10 % [10], который случайным образом обнуляет 10 % весов слоя. Это помогает бороться с переобучением при классификации [11]. Также к каждому слою применяется спектральная нормализация [12], которая позволяет добиться 1-липшицева отображения для дискриминатора [13]. Выходной слой состоит из одного нейрона с линейной функцией активации. Чем больше полученное значение, тем дискриминатор «увереннее» считает рассмотренные значения «реалистичными».

В работе использована разновидность генеративно-состязательной сети с функцией потерь в виде наименьших квадратов.

Для таких сетей справедливы следующие выражения для функций потерь дискриминатора (L_D) и генератора (L_G) [5]:

$$L_D = \frac{1}{2}E_{x\sim p_{data}(x)}\left[\left(D(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{y}) - b\right)^2\right] + \frac{1}{2}E_{z\sim p(z)}\left[\left(D(G(\mathbf{z}\,|\,\mathbf{y})) - a\right)^2\right], \qquad (1)$$

$$L_G = \frac{1}{2}E_{z\sim p(z)}\left\{\left[D(G(\mathbf{z}\,|\,\mathbf{y})) - c\right]^2\right\}, \qquad (2)$$

где $D(...)$ – сеть дискриминатора; $G(...)$ – сеть генератора; $\mathbf{x}$ – эталонные данные; $\mathbf{z}$ – вектор шума; $D(\mathbf{x})$ – значения, полученные дискриминатором на основе эталонных данных; $D(G(\mathbf{z}))$ – значения, найденные дискриминатором на основе данных, полученных генератором; E – математическое ожидание; a, b – гиперпараметры данной функции потерь, равные 0 и 1 соответственно [5].

В данном исследовании генеративно-состязательная сеть обучалась 400 эпох. В качестве оптимизатора градиентного спуска использовался RMSProp со значением ρ = 0,9 [14] и шагами обучения $1{\cdot}10^{-4}$ для генератора и $5{\cdot}10^{-5}$ для дискриминатора. Использование разных шагов обучения способствует лучшей сходимости при обучении, что показано в работе [15].

Результаты моделирования

Ввиду большого числа возможных конфигураций рассеяния (различные типы лептона и значения начальной энергии E_0), для демонстрации работы ГСС далее приведены лишь некоторые конфигурации.

На рис. 2 представлены распределения компонент импульса мюона μ^+ и электрона e^- в конечных состояниях, полученные с помощью ГСС и программы PYTHIA8. Видно, что модель генерирует величины, распределения которых практически не различаются, о чем говорят приведенные на графиках значения χ^2 и соответствующие им значения импульса (p-value) [17].

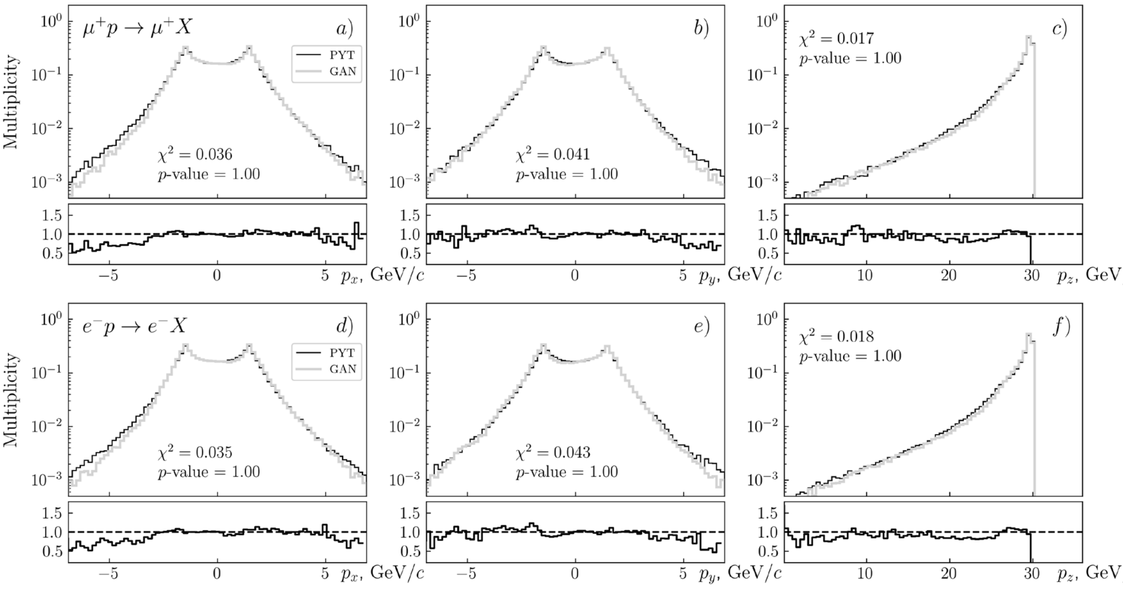


Рис. 2. Предсказанные графики распределений по компонентам импульсов p_x, p_y, p_z для мюона μ^+ (*a*, *b*, *c*) и электрона e^- (*d*, *e*, *f*) при одинаковых значениях начальной энергии E_0 = 30 ГэВ. Получены с помощью ГСС (кривые серого цвета) и PYTHIA8 (черного цвета).
Для каждого распределения приведено соответствующее значение χ^2 и график отношения предсказания ГСС к PYTHIA8 (GAN/PYT)

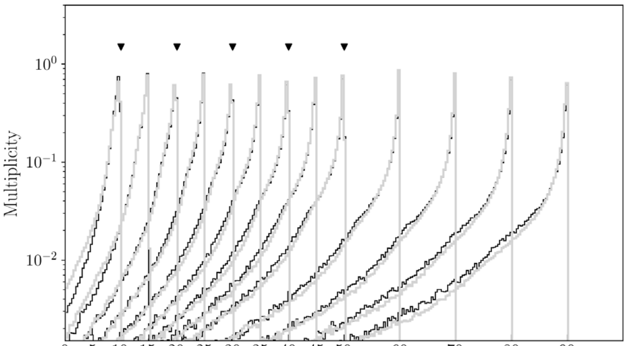


Рис. 3. Распределения компоненты p_z-импульса электрона, предсказанные с помощью программы PYTHIA8 (кривые серого цвета) и с помощью ГСС (черного цвета), при разных значениях начальной энергии E_0.
Треугольными указателями отмечены значения энергии, при которых модель обучалась

На рис. 3 представлены распределения p_z-компоненты импульса конечного электрона при различных энергиях, полученные с помощью ГСС и программы PYTHIA8. Анализ представленных результатов позволяет заключить, что модель способна предсказывать верные распределения как при энергиях, на которых проводилось обучение (10, 20, 30, 40, 50 ГэВ), так и при интерполированных энергиях (15, 25, 35, 45 ГэВ). Стоит также отметить, что модель может предсказывать значения p_z и при бóльших энергиях E_0 (60, 70, 80, 90 ГэВ).

Представляют интерес не только значения импульса и энергии лептона, но и значения производных от них величин, которые используются для характеристики рассеяния. К таким величинам относятся квадрат переданного импульса $Q^2 = -q^2$ (q – импульс виртуального фотона) и переменная Бьёркина $x_{\text{Bj}} = Q^2/2Pq$ (P – импульс налетающего протона).

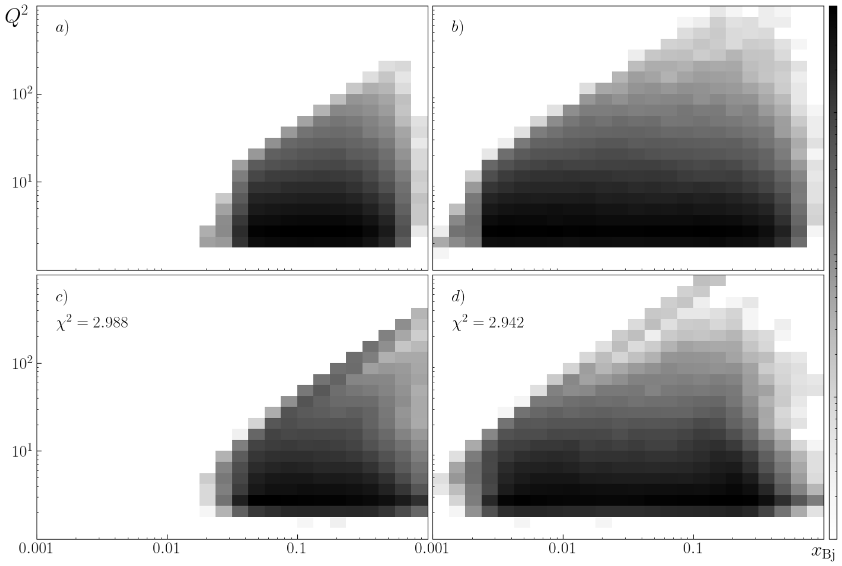


Рис. 4. Графики совместного распределения величин Q^2 и x_{Bj} для электрона при значениях начальной энергии E_0 = 10 ГэВ (*a*, *c*) и 40 ГэВ (*b*, *d*), предсказанные с помощью PYTHIA8 (*a*, *b*) и ГСС (*c*, *d*).
Для характеристики точности предсказания ГСС приведены значения χ^2 при каждом значении E_0

На рис. 4 представлены совместные распределения Q^2 и x_{Bj} при энергиях E_0 = 10 и 40 ГэВ, полученные на основе данных PYTHIA8 и ГСС. Сравнение между распределениями на рис. 4, *a* и *b* и таковыми на рис. 4, *c* и *d*, полученными двумя путями при двух значениях E_0 (10 и 40 ГэВ), указывает на хорошее согласие между распределениями, полученными с помощью PYTHIA8 и ГСС. В качестве количественной оценки этого согласия приведены значения χ^2, рассчитанные по всем бинам распределений.

Заключение

В работе рассмотрено применение генеративно-состязательной сети (ГСС) для генерации конечного состояния лептона в инклюзивном глубоконеупругом лептон-протонном рассеянии в диапазоне начальных энергий 20 – 100 ГэВ в системе центра масс.

Показано, что разработанная модель способна генерировать распределения различных характеристик разных конечных лептонов, включая величины, которые рассчитываются на основе изначально сгенерированных. ГСС способна генерировать распределения не только при начальных энергиях центра масс, при которых велось обучение, но и при интерполированных значениях энергии (ГэВ): 15, 25, 35, 45.

Кроме того, показано, что модель может генерировать требуемые распределения и при экстраполированных начальных энергиях (ГэВ): 120, 140, 160 и 180.

В дальнейшем несомненный интерес представляет рассмотрение полуинклюзивного, глубоконеупругого рассеяния с генерацией характеристик дополнительной частицы, в частности пиона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Goodfellow I., Pouget-Abadie J., Mirza M., Xu B., Warde-Farley D., Ozair S., Courville A., Bengio Y.** Generative adversarial networks // Communications of the ACM. 2020. Vol. 63. No. 11. Pp. 139–144.

2. **Karras T., Laine S., Aila T.** A style-based generator architecture for generative adversarial networks // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Long Beach, USA, June 15–20, 2019. Pp. 4401–4410.

3. **Clark A., Donahue J., Simonyan K.** Adversarial video generation on complex datasets. arXiv: 1907.06571v2, 2019. https://doi.org/10.48550/arXiv. 1907.06571.

4. **Gulrajani I., Ahmed F., Arjovsky M., Dumoulin V., Courville A.** Improved training of Wasserstein GANs. arXiv: 1704.00028v3, 2017. https: //doi.org/ 10.48550/arXiv.1704.00028.

5. **Mao X., Li Q., Xie H., Lau R. Y. K., Wang Zh., Smolley S. P.** On the effectiveness of least squares generative adversarial networks // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2019. Vol. 41. No. 12. Pp. 2947–2960.

6. **Hashemi B., Amin N., Datta K., Olivito D., Pierini N.** LHC analysis-specific datasets with Generative Adversarial Networks. arXiv: 1901.05282v1, 2019. https: //doi.org/10.48550/arXiv.1901.05282.

7. **Alanazi Y., Sato N., Liu T., et al.** Simulation of electron-proton scattering events by a Feature-Augmented and Transformed Generative Adversarial Network (FAT-GAN). arXiv: 2001.11103v2, 2019. https: //doi.org/10.48550/arXiv.2001. 11103.

8. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.** A brief introduction to PYTHIA 8.1 // Computer Physics Communications. 2008. Vol. 178. No. 11. Pp. 852–867.

9. **Sharma O.** A new activation function for deep neural network // Proceedings of the International Conference on Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon). IEEE, Faridabad, India, February 14–16, 2019. Pp. 84–86.

10. **Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Slutskever I., Salakhutdinov R.** Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting // The Journal of Machine Learning Research. 2014. Vol. 15. Pp. 1929–1958.

11. **Hawkins D. M.** The problem of overfitting // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2003. Vol. 44. No. 1. Pp. 1–12.

12. **Miyato T., Kataoka T., Koyama M., Yoshida Y.** Spectral normalization for Generative Adversarial Networks. arXiv: 1802.05957/v1, 2018. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.05957.

13. **Qin Y., Mitra N., Wonka C.** How does Lipschitz regularization influence GAN training? // Computer Vision – ECCV 2020. Springer International Publishing, 2020. Pp. 310–326. https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.09567

14. **Xu D., Zhang Sh., Zhang H., Mandic D. P.** Convergence of the RMSProp deep learning method with penalty for nonconvex optimization // Neural Networks. 2021. Vol. 139. July. Pp. 17–23.

15. **Heusel M., Ramsauer H., Unterthiner T., Nessler B., Hochreiter S.** GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local Nash equilibrium. arXiv: 1706.08500v6, 2017. https://doi.org/10.48550/arXiv.1706. 08500.

16. **McHugh M. L.** The chi-square test of independence // Biochemia Medica. 2013. Vol. 23. No. 2. Pp. 143–149.

REFERENCES

1. **Goodfellow I., Pouget-Abadie J., Mirza M., et al.,** Generative Adversarial Networks, Commun. ACM. 63 (11) (2020) 139–144.

2. **Karras T., Laine S., Aila T.,** A style-based generator architecture for Generative Adversarial Networks, Proc. IEEE/CVF Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Long Beach, USA, June 15–20 (2019) 4401–4410.

3. **Clark A., Donahue J., Simonyan K.,** Adversarial video generation on complex datasets, arXiv: 1907.06571v2, 2019. https://doi.org/10.48550/arXiv. 1907.06571.

4. **Gulrajani I., Ahmed F., Arjovsky M., et al.,** Improved training of Wasserstein GANs, arXiv:1704.00028v3, 2017. https: //doi.org/ 10.48550/arXiv. 1704.00028.

5. **Mao X., Li Q., Xie H., et al.,** On the effectiveness of least squares Generative Adversarial Networks, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 41 (12) (2019) 2947–2960.

6. **Hashemi B., Amin N., Datta K., et al.,** LHC analysis-specific datasets with Generative Adversarial Networks. arXiv: 1901.05282v1, 2019. https: //doi.org/10.48550/arXiv.1901.05282.

7. **Alanazi Y., Sato N., Liu T., et al.,** Simulation of electron-proton scattering events by a Feature-Augmented and Transformed Generative Adversarial Network (FAT-GAN). arXiv: 2001.11103v2, 2019. https: //doi.org/10.48550/arXiv.2001. 11103.

8. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.,** A brief introduction to PYTHIA 8.1, Comput. Phys. Commun. 178 (11) (2008) 852–867.

9. **Sharma O.,** A new activation function for deep neural network, Proc. Int. Conf. Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon), IEEE, Faridabad, India, Febr. 14–16 (2019) 84–86.

10. **Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., et al.,** Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting, J. Mach. Learn. Res. 15 (2014) 1929–1958.

11. **Hawkins D. M.,** The problem of overfitting, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 44 (1) (2003) 1–12.

12. **Miyato T., Kataoka T., Koyama M., Yoshida Y.,** Spectral normalization for Generative Adversarial Networks, arXiv: 1802.05957/v1, 2018. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.05957.

13. **Qin Y., Mitra N., Wonka C.,** How does Lipschitz regularization influence GAN training? Computer Vision – ECCV 2020, Springer Int. Publ. (2020) 310–326. https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.09567

14. **Xu D., Zhang Sh., Zhang H., Mandic D. P.,** Convergence of the RMSProp deep learning method with penalty for nonconvex optimization, Neural Netw. 139 (July) (2021) 17–23.

15. **Heusel M., Ramsauer H., Unterthiner T., et al.,** GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local Nash equilibrium, arXiv: 1706.08500v6, 2017. https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.08500.

16. **McHugh M. L.,** The chi-square test of independence, Biochem. Med. 23 (2) (2013) 143–149.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛОБАНОВ Андрей Александрович – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

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

THE AUTHORS

LOBANOV Andrey A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

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

Статья поступила в редакцию 20.07.2023. Одобрена после рецензирования 31.07.2023. Принята 31.07.2023.

Received 20.07.2023. Approved after reviewing 31.07.2023. Accepted 31.07.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Научная статья
УДК 539.12
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16415

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУИНКЛЮЗИВНОГО, ГЛУБОКОНЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЛЕПТОНА НА ПРОТОНЕ ПРИ ЭНЕРГИЯХ 20 – 100 ГэВ НА ОСНОВЕ ГЕНЕРАТИВНО-СОСТЯЗАТЕЛЬНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

А. А. Лобанов ✉, **Я. А. Бердников**

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Аннотация. Данная работа продолжает цикл статей, посвященных развитию возможностей генератора событий глубоконеупругого лептон-протонного рассеяния на основе генеративно-состязательной сети (ГСС). Здесь рассмотрены полуинклюзивные реакции глубоконеупругого рассеяния с регистрацией адрона. Показано, что ГСС позволяет с высокой точностью генерировать распределения физических характеристик конечных лептона и адрона в диапазоне начальных энергий 20 – 100 ГэВ в системе центра масс.

Ключевые слова: полуинклюзивное, глубоконеупругое рассеяние; машинное обучение; нейронная сеть; генеративно-состязательная сеть

Для цитирования: Лобанов А. А., Бердников Я. А. Моделирование полуинклюзивного, глубоко неупругого рассеяния лептона на протоне при энергиях 20 – 100 ГэВ на основе генеративно-состязательной нейронной сети // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 189–197. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16415

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16415

SIMULATION OF SEMI-INCLUSIVE DEEP INELASTIC LEPTON SCATTERING ON A PROTON AT ENERGIES OF 20 – 100 GeV ON THE BASIS OF A GENERATIVE-ADVERSARIAL NEURAL NETWORK

A. A. Lobanov ✉, **Ya. A. Berdnikov**

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

✉ lobanov2.aa@edu.spbstu.ru

Abstract. This paper continues a series of articles devoted to developing the capabilities of a deep inelastic lepton-proton scattering event generator based on the generative adversarial network (GAN). The investigation has focused on semi-inclusive reactions of deep inelastic scattering and, particularly, on hadron registration. The results confirmed that GAN could accurately generate distributions of physical properties of leptons and hadrons. It worked for different types of leptons and hadrons in the range of initial energies from 20 to 100 GeV in the center-of-mass system. The GAN demonstrated the possibility to preserve the inherent correlation between the characteristics of leptons and protons.

Keywords: semi-inclusive deep inelastic scattering, machine learning, neural network, generative-adversarial network

For citation: Lobanov A. A., Berdnikov Ya. A., Simulation of semi-inclusive deep inelastic lepton scattering on a proton at energies of 20 – 100 GeV on the basis of a generative-adversarial neural network, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 189–197. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16415

Введение

Как известно [1], в современных экспериментальных исследованиях в области физики высоких энергий приходится иметь дело со все большими и большими массивами данных. Источниками последних выступают крупномасштабные эксперименты или результаты моделирования. Работа с этой информацией требует привлечения больших вычислительных мощностей и временных затрат.

В качестве одного из подходов для решения вышеупомянутых проблем могут быть использованы методы машинного обучения [2]. На основе этих методов можно построить программы компьютерного моделирования (называемые генераторами событий), открывающие следующие новые возможности:

на основе экспериментальных результатов по изучению продуктов взаимодействия частиц и ядер в дискретных точках предсказывать по значениям начальной энергии характеристики вторичных частиц при любых энергиях в исследуемом интервале на основе интерполяции (и, возможно, экстраполяции), причем быстро и без больших вычислительных затрат;

даже при отсутствии результатов экспериментов, для разработки вышеупомянутых программных продуктов можно использовать результаты моделирования исследуемых взаимодействий частиц и ядер, полученные на основе метода Монте-Карло [3].

В статье [4] было рассмотрено применение генеративно-состязательной сети (ГСС) для создания генератора инклюзивного, глубоко неупругого лептон-протонного рассеяния.

Данная работа продолжает развивать эту проблему; теперь рассмотрено распространение возможностей указанного генератора событий [4] на полуинклюзивное, глубоконеупругое рассеяние с регистрацией адрона.

Целью работы является построение генератора, который может обучаться на экспериментальных (или полученных в результате компьютерного моделирования) данных и позволяет на основе интерполяции и экстраполяции получать промежуточные данные, поскольку эксперимент невозможно проводить при любых значениях начальной энергии.

Интерес к полуинклюзивным процессам вызван несколькими причинами.

Во-первых, регистрация дополнительного адрона позволяет больше узнать о структуре протона. Так, тип рожденного в лептон-протонном взаимодействии адрона будет зависеть от того, с каким ароматом кварка в протоне провзаимодействовал виртуальный фотон, испущенный заряженным лептоном [5].

Во-вторых, характеристики дополнительного адрона могут нести информацию о процессах адронизации партонов [5].

В-третьих, в ходе полуинклюзивных процессов есть возможность измерять различные спиновые и азимутальные асимметрии, а это позволяет составить представление о спиновой структуре протона [6].

Методика исследования

Характеристиками конечного состояния заряженного лептона (e^+, e^-, μ^+, μ^-) и адрона (π^0, π^+, π^-, K^+, K^-) выступают их 4-импульсы $p_l = (E_l, \mathbf{p}_l)$ и $p_h= (E_h, \mathbf{p}_h)$ соответственно, где E_l – полная энергия рассеянного лептона; p_l, $\mathbf{p}_l$ – четырех- и трехмерный векторы импульса лептона, причем последний определяется через его компоненты p_{xl}, p_{yl}, p_{zl}; E_h – полная энергия адрона, p_h, $\mathbf{p}_h$ – четырех- и трехмерный векторы импульса адрона, и также компоненты последнего – p_{xh}, p_{yh}, p_{zh}.

Для того, чтобы ГСС могла предсказывать 4-импульс различных адронов (π^0, π^+, π^-, K^+, K^-), их тип (как и тип лептона) передается на вход ГСС в качестве дополнительных параметров вместе с начальной энергией E_0, определяемой как $E_0 \approx \sqrt{s_{lN}}/2$, где $\sqrt{s_{lN}}$ – начальная энергия в системе центра масс лептон-протон [4].

Поскольку в настоящее время получать характеристики конечных лептонов и адронов из эксперимента не представляется возможным (из-за отсутствия экспериментов), конечные состояния лептонов и адронов были получены с использованием программного пакета PYTHIA8 [7].

Для каждого типа лептона (e^+, e^-, μ^+, μ^-) и адрона (π^0, π^+, π^-, K^+, K^-) было сгенерировано по 100 тыс. событий при начальных энергиях $\sqrt{s_{lN}}$ = 20, 40, 60, 80 и 100 ГэВ. Из каждого события были получены значения 4-импульсов конечного лептона и адрона (эталонные данные).

Для решения проблем, связанных с нерегулярностями в распределениях по величинам E_l, E_h и p_{zl}, в настоящем исследовании, как и в работе [4], использована генерация не самих величин E_l, E_h, p_{zl}, а величин, полученных в результате их преобразования (преобразованные величины):

$$T(p_{zl}) = \log\left[(E_0 - p_{zl})/(1\ \text{GeV}/c)\right],$$

$$T(E_l) = \log\left[(E_0 - E_l)/(1\ \text{GeV}/c)\right],$$

$$T(E_h) = \log\left[E_h/(1\ \text{GeV}/c)\right].$$

Распределение по преобразованным величинам, как показано в работе [4], становится более гладким и позволяет избежать предсказания нефизических значений.

Так же, как в статье [4], в данной работе генератор событий строится на основе ГСС с функцией потерь по методу наименьших квадратов [8].

Генератор состоит из 5 слоев по 512 нейронов с функцией активации «Leaky ReLU» и показателем 0,2 [9]. Ему на вход поступают 128-мерный вектор шума (вектор значений, полученных из распределения Гаусса со средним, равным 0, и дисперсией, равной 1), энергия E_0, тип лептона и тип адрона. На выходе генератора получаем 8 характеристик:

$$p_{xl}, p_{yl}, T(p_{zl}), T(E_l), p_{xh}, p_{yh}, p_{zh} \text{ и } T(E_h),$$

соответствующих лептону и адрону.

На основе этих характеристик в модели рассчитываются дополнительные величины, используемые для повышения точности предсказания ГСС, [4]:

$p_{Tl} = \sqrt{p_{xl}^2 + p_{yl}^2}$, $p_{Th} = \sqrt{p_{xh}^2 + p_{yh}^2}$ – поперечные импульсы лептона и адрона, соответственно;

$\varphi_l = \arctan(p_{zl}/p_{Tl})$, $\varphi_h = \arctan(p_{zh}/p_{Th})$ – азимутальные углы лептона и адрона, соответственно;

$\theta_l = \arctan(p_{yl}/p_{xl})$, $\theta_h = \arctan(p_{yh}/p_{xh})$ – полярные углы лептона и адрона, соответственно.

Все дополнительные величины далее передаются на вход дискриминатора при обучении.

Дискриминатор также состоит из 5 слоев по 512 нейронов с функцией активации «Leaky ReLU» и показателем 0,2 [9]. Для борьбы с переобучением дискриминатора [10], к каждому слою применяется «dropout layer» с коэффициентом 10 % [11], который случайным образом обнуляет 10 % весов слоя. Для более стабильного обучения, ко всем слоям дополнительно применяется спектральная нормализация [12]. Выходной слой состоит из одного нейрона с линейной функцией активации. Чем больше полученное значение, тем «увереннее» дискриминатор считает рассмотренные значения «реалистичными».

Модель обучалась 400 эпох. Оптимизатор градиентного спуска был выбран RMSProp со значениями ρ = 0,9 [13], шагов обучения $1 \cdot 10^{-4}$ для генератора и $5 \cdot 10^{-5}$ для дискриминатора. Использование разных шагов обучения способствует лучшей сходимости при обучении, что показано в работе [14].

В качестве критерия оценки степени расхождения между эталонными данными и сгенерированными ГСС было использовано расстояние Кульбака – Лейбера (КЛ) [15]. Данный критерий применялся для сравнения гистограмм полученных распределений. В этом случае расстояние Кульбака – Лейбера DKL определяется следующим образом [15]:

$$D_{KL}(P\,||\,Q)=\sum_{i=1}^{n} p_i \log\frac{p_i}{q_i},$$

где P, Q – распределения эталонных и сгенерированных данных, соответственно; p_i, q_{i} – вероятности i-х бинов гистограмм эталонных и сгенерированных данных; n – число бинов.

Результаты моделирования

По причине большого числа различных вариантов рассеяния (это разные типы лептонов и адронов, а также разные значения начальной энергии E_0), для демонстрации результатов предсказания ГСС далее приведены лишь отдельные возможные варианты.

На рис. 1 представлены распределения по величинам p_T, θ, φ для позитрона e^+ и отрицательного каона K^-, полученные с помощью ГСС и PYTHIA8. Под множественностью (Multiplicity) понимается (на рис. 1 и далее) число отсчетов в бине, нормированное на общее число событий. Видно, что модель генерирует величины, распределения которых практически идентичны, о чем говорят приведенные на графиках значения расстояния Кульбака – Лейбера, а также логарифмы отношения предсказаний ГСС к данным PYTHIA8, приведенные для каждого графика.

На рис. 2 представлены распределения величин p_T, θ, φ для мюона μ^- и положительного каона K^+, полученные с помощью ГСС и PYTHIA8. Приведенные данные

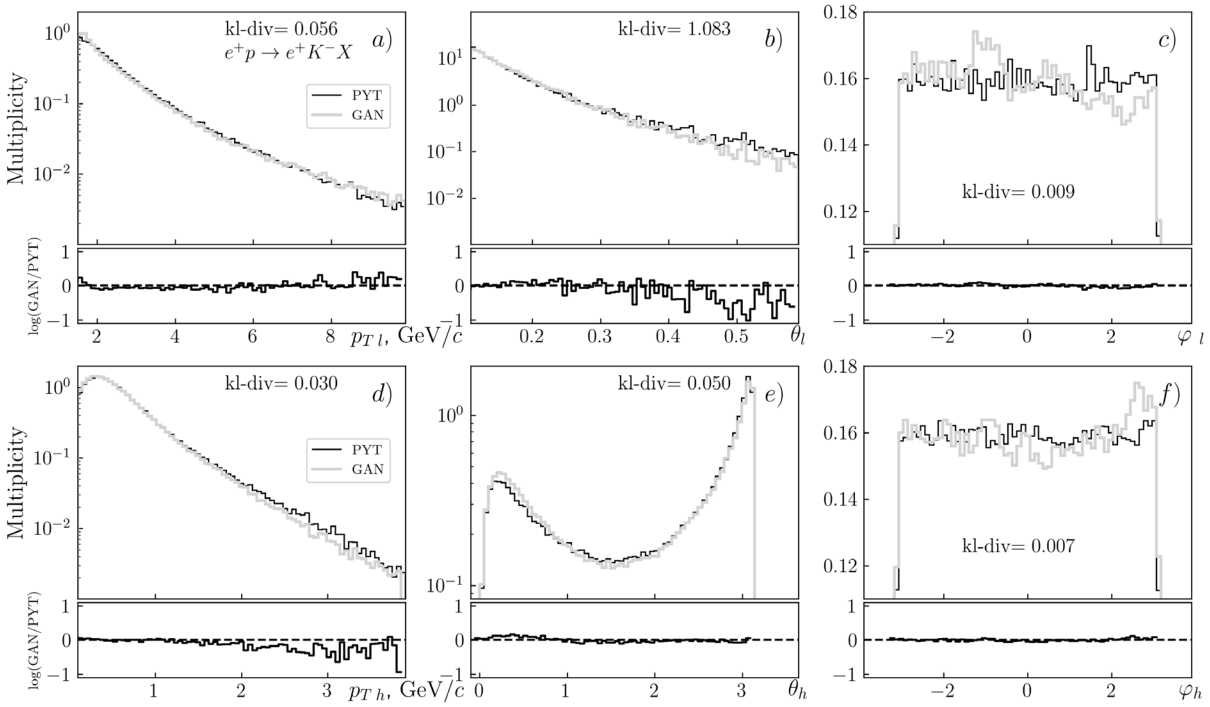


Рис. 1. Распределения по величинам p_T, θ, φ для позитронов e^+ (a, b, c) и отрицательных каонов K^- (d, e, f) при начальной энергии E_0 = 50 ГэВ.

Данные получены с помощью ГСС (кривые серого цвета) и PYTHIA8 (черного цвета). Для каждого распределения приведено соответствующее значение расстояния КЛ (kl-div) и график логарифма отношения предсказания ГСС к PYTHIA8 (GAN/PYT)

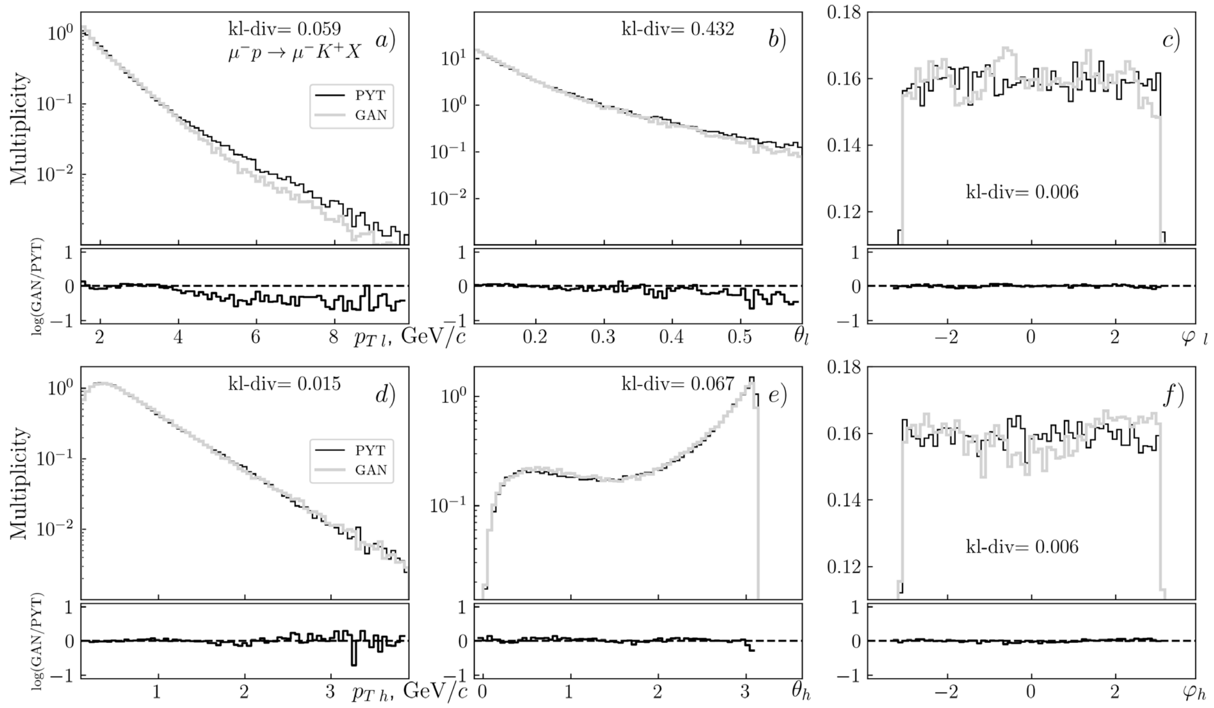


Рис. 2. Графики, аналогичные приведенным на рис. 1, но для мюонов μ^- (a, b, c) и положительных каонов K^+ (d, e, f) при начальной энергии E_0 = 20 ГэВ

демонстрируют, что модель способна так же точно работать с различными лептонами и адронами при разных начальных энергиях.

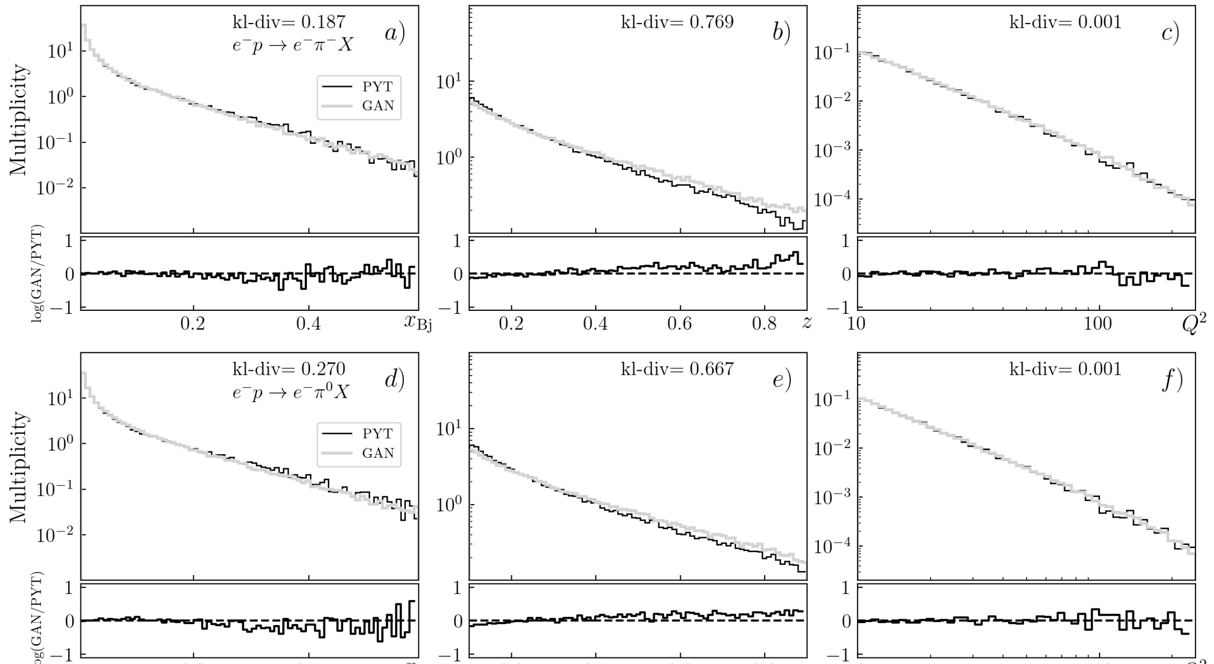


Рис. 3. Распределения по величинам x_{Bj}, z, Q^2 для реакций $e^- p \to e^- \pi^- X$ (a, b, c) и $e^- p \to e^- \pi^0 X$ (d, e, f) соответственно, при начальной энергии E_0 = 40 ГэВ.
Для каждого распределения приведено соответствующее значение расстояния КЛ (kl-div) и график логарифма отношения предсказания ГСС к PYTHIA8 (GAN/PYT)

На рис. 3 представлены распределения величин квадрата переданного импульса $Q^2 = -q^2$ (q – импульс виртуального фотона), а также переменной Бьёркина $x_{\text{Bj}} = Q^2/2Pq$ (P – импульс налетающего протона) и доли энергии виртуального фотона, переданной адрону, $z = P{\cdot}P_h \,/\, P{\cdot}q$ (P_h – импульс адрона) для ядерных реакций

$$e^-p \to e^-\pi^-X \text{ и } e^-p \to e^-\pi^0X,$$

где буквой X обозначены все остальные продукты реакции.

Из представленных результатов следует, что распределения, сгенерированные моделью, различаются слабо; на это указывают значения расстояния КЛ, полученные для каждого распределения.

На рис. 4 приведены распределения по величинам x_{Bj}, z, Q^2 для реакций $e^+p \to e^+\pi^+X$ и $e^+p \to e^+K^-X$. Анализ полученных данных приводит к заключению, что точность предсказания ГСС относительно эталонных данных PYTHIA8 сохраняется при различных типах лептона и адрона и разных значениях начальной энергии.

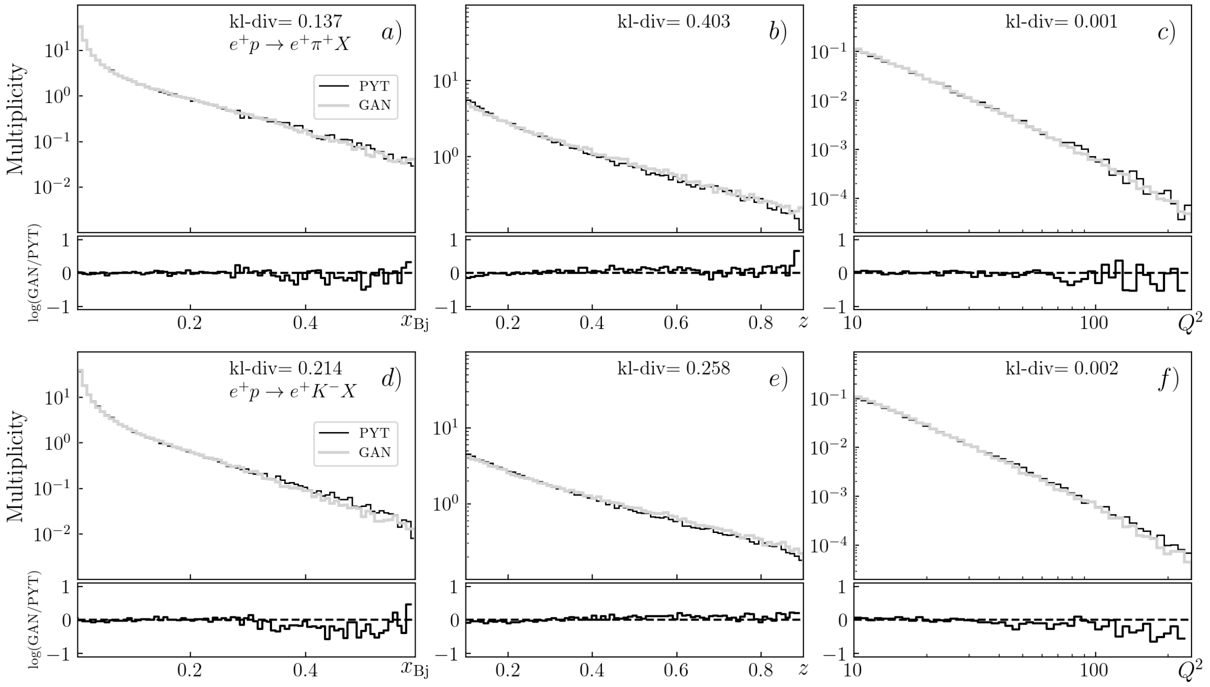


Рис. 4. Распределения по величинам x_{Bj}, z, Q^2 для реакций $e^-p \to e^-\pi^-X$ (a, b, c) и $e^-p \to e^-\pi^0X$ (d, e, f) при начальной энергии $E_0 = 30$ ГэВ.

Для каждого распределения приведено соответствующее значение расстояния КЛ (kl-div) и график логарифма отношения предсказания ГСС к PYTHIA8 (GAN/PYT)

Заключение

В данной статье разработана модель генеративно-состязательной сети, способная предсказывать характеристики конечных лептонов (e^+, e^-, μ^+, μ^-) и адронов (π^0, π^+, π^-, K^+, K^-) в полуинклюзивном лептон-протонном, глубоконеупругом рассеянии в диапазоне начальных энергий 20 – 100 ГэВ.

Установлено, что вышеупомянутая модель ГСС способна с высокой точностью получать компоненты 4-импульсов конечных лептонов и адронов.

Показано, что полученная модель способна с высокой точностью рассчитывать распределения для частиц: по поперечному импульсу частиц p_T, по азимутальному (φ) и полярному (θ) углам, по переменной Бьёркена x_{Bj}, по значениям доли энергии виртуального фотона z и квадрату переданного лептоном адрону Q^2. Распределения по этим величинам показывают высокую точность относительно эталонных данных, что говорит о способности модели сохранять внутренние связи между величинами.

Установлено также, что модель ГСС точно предсказывает характеристики лептонов и адронов как при начальных энергиях, при которых велось обучение, так и при интерполированных значениях начальной энергии (промежуточные значения энергии).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cremonesi M., Bellini C., Bian B., et al.** Using big data technologies for HEP analysis. arXiv: 1901.07143, 2019. https://doi.org/10.48550/ arXiv. 1901. 07143

2. **Jordan M. I., Mitchell T. M.** Machine learning: Trends, perspectives, and prospects // Science. 2015. Vol. 349. No. 6245. Pp. 255–260.

3. **Weinzierl S.** Introduction to Monte Carlo methods. arXiv: 0006269, 2000. https://doi.org/10.48550/arXiv.hep-ph/0006269.

4. **Лобанов А. А., Бердников Я. А.** Генератор глубоконеупругого рассеяния лептонов на протоне на основе генеративно-состязательной нейронной сети // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 181–188.

5. **Aschenauer E. C., Borsa I., Sassot R., Van Hulse C.** Semi-inclusive deep-inelastic scattering, parton distributions, and fragmentation functions at a future electron-ion collider // Physical Review D. 2019. Vol. 99. No. 9. P. 094004.

6. **Barone V., Boglione M., Hernandez J. O. G., Melis S.** Phenomenological analysis of azimuthal asymmetries in unpolarized semi-inclusive deep inelastic scattering // Physical Review D. 2015. Vol. 91. No. 7. P. 074019.

7. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.** A brief introduction to PYTHIA 8.1 // Computer Physics Communications. 2008. Vol. 178. No. 11. Pp. 852–867.

8. **Mao X., Li Q., Xie H., Lau R. Y. K., Wang Zh., Smolley S. P.** On the effectiveness of least squares generative adversarial networks // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2019. Vol. 41. No. 12. Pp. 2947–2960.

9. **Sharma O.** A new activation function for deep neural network // Proceedings of the International Conference on Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon). IEEE, Faridabad, India, February 14–16, 2019. Pp. 84–86.

10. **Hawkins D. M.** The problem of overfitting // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2003. Vol. 44. No. 1. Pp. 1–12.

11. **Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Slutskever I., Salakhutdinov R.** Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting // The Journal of Machine Learning Research. 2014. Vol. 15. Pp. 1929–1958.

12. **Miyato T., Kataoka T., Koyama M., Yoshida Y.** Spectral normalization for Generative Adversarial Networks. arXiv: 1802.05957/v1, 2018. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.05957.

13. **Xu D., Zhang Sh., Zhang H., Mandic D. P.** Convergence of the RMSProp deep learning method with penalty for nonconvex optimization // Neural Networks. 2021. Vol. 139. July. Pp. 17–23.

14. **Heusel M., Ramsauer H., Unterthiner T., Nessler B., Hochreiter S.** GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local Nash equilibrium. arXiv: 1706.08500v6, 2017. https://doi.org/10.48550/arXiv.1706. 08500.

15. **Shlens J.** Notes on Kullback – Leibler divergence and likelihood. arXiv: 1404.2000, 2014. https://doi.org/10.48550/arXiv.1404.2000.

REFERENCES

1. **Cremonesi M., Bellini C., Bian B., et al.,** Using big data technologies for HEP analysis. arXiv: 1901.07143, 2019. https://doi.org/10.48550/arXiv.1901. 07143.

2. **Jordan M. I., Mitchell T. M.,** Machine learning: Trends, perspectives, and prospects, Science. 349 (6245) (2015) 255–260.

3. **Weinzierl S.,** Introduction to Monte Carlo methods. arXiv: 0006269, 2000. https://doi.org/10.48550/arXiv.hep-ph/0006269.

4. **Lobanov A. A., Berdnikov Ya. A.,** A generator of deep inelastic lepton-proton scattering based on the Generative-Adversarial Network (GAN), St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 181–188. (in Russian).

5. **Aschenauer E. C., Borsa I., Sassot R., Van Hulse C.,** Semi-inclusive deep-inelastic scattering, parton distributions, and fragmentation functions at a future electron-ion collider, Phys. Rev. D. 99 (9) (2019) 094004.

6. **Barone V., Boglione M., Hernandez J. O. G., Melis S.,** Phenomenological analysis of azimuthal asymmetries in unpolarized semi-inclusive deep inelastic scattering, Phys. Rev. D. 91 (7) (2015) 074019.

7. **Sjöstrand T., Mrenna S., Skands P.,** A brief introduction to PYTHIA 8.1, Comput. Phys. Commun. 178 (11) (2008) 852–867.

8. **Mao X., Li Q., Xie H., et al.,** On the effectiveness of least squares Generative Adversarial Networks, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 41 (12) (2019) 2947–2960.

9. **Sharma O.,** A new activation function for deep neural network, Proc. Int. Conf. Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon), IEEE, Faridabad, India, Febr. 14–16 (2019) 84–86.

10. **Hawkins D. M.,** The problem of overfitting, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 44 (1) (2003) 1–12.

11. **Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., et al.,** Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting, J. Mach. Learn. Res. 15 (2014) 1929–1958.

12. **Miyato T., Kataoka T., Koyama M., Yoshida Y.,** Spectral normalization for Generative Adversarial Networks, arXiv: 1802.05957/v1, 2018. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.05957.

13. **Xu D., Zhang Sh., Zhang H., Mandic D. P.,** Convergence of the RMSProp deep learning method with penalty for nonconvex optimization, Neural Netw. 139 (July) (2021) 17–23.

14. **Heusel M., Ramsauer H., Unterthiner T., et al.,** GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local Nash equilibrium, arXiv: 1706.08500v6, 2017. https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.08500.

15. **Shlens J.,** Notes on Kullback–Leibler divergence and likelihood, arXiv: 1404.2000, 2014. https://doi.org/10.48550/arXiv.1404.2000.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛОБАНОВ Андрей Александрович – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

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

THE AUTHORS

LOBANOV Andrey A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lobanov2.aa@edu.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-8910-4775

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

Статья поступила в редакцию 28.09.2023. Одобрена после рецензирования 12.10.2023. Принята 12.10.2023.

Received 28.09.2023. Approved after reviewing 12.10.2023. Accepted 12.10.2023.

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023
St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4

Радиофизика

Научная статья
УДК 535.5, 535-4, 535.012.2
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16416

ВОЛОКОННЫЕ СВЕТОВОДЫ SPUN-ТИПА И ИХ ОПИСАНИЕ В РАМКАХ ФОРМАЛИЗМА МАТРИЦ ДЖОНСА ПРИ АНАЛИЗЕ ПРАКТИЧЕСКИХ ОПТОВОЛОКОННЫХ СХЕМ

В. С. Темкина ✉, **Л. Б. Лиокумович, А. Б. Арчелков**
А. В. Медведев, А. С. Козлов, К. В. Грешневиков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ temkina_vs@spbstu.ru

Аннотация. В работе получено выражение для матрицы Джонса реального волоконного световода spun-типа, которое учитывает слабое отклонение его свойств от таковых для случая идеализированного представления этого волокна матрицей поворота. Вывод проведен в рамках модели оптического элемента с фазовой анизотропией. Рассмотрены особенности использования полученной матрицы Джонса реального spun-волокна при анализе практических оптоволоконных схем и моделировании их сигналов. Выполнены эксперименты со spun-волокном, демонстрирующие отклонение параметров поляризационных мод реального волокна от идеализированной модели и позволившие оценить уровень этого отклонения.

Ключевые слова: формализм матриц Джонса, spun-волокно, фазовая анизотропия, состояние поляризации света

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00513 (https://rscf.ru/project/22-19-00513/).

Для цитирования: Темкина В. С., Лиокумович Л. Б., Арчелков А. Б., Медведев А. В., Козлов А. С., Грешневиков К. В. Волоконные световоды spun-типа и их описание в рамках формализма матриц Джонса при анализе практических оптоволоконных схем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 198–214. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16416

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16416

SPUN FIBERS AND THEIR DESCRIPTION WITHIN THE JONES FORMALISM IN ANALYZING THE PRACTICAL FIBER-OPTIC CIRCUITS

V. S. Temkina ✉, **L. B. Liokumovich, A. B. Archelkov,**
A. V. Medvedev, A. S. Kozlov, K. V. Greshnevikov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ temkina_vs@spbstu.ru

Abstract. In this paper, an analytical form for the Jones matrix of a real spun fiber has been obtained, taking into account a slight deviation of its properties from an idealized representation of this fiber by the rotation matrix. The derivation was made within the framework of

Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

the optical element model with phase anisotropy. The features of using the Jones matrix of a real spun fiber in the analysis of practical fiber-optic circuits and modeling their signals were considered. The experiments with the spun fiber revealing the parameter deviations of the polarization modes of the real spun fiber from the idealized model and allowing estimation of this deviation level were performed.

Keywords: Jones matrix formalism, spun fiber, phase anisotropy, polarization state of light

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation, Grant No. 22-19-00513 (https://rscf.ru/en/project/22-19-00513/)

For citation: Temkina V. S., Liokumovich L. B., Archelkov A. B., Medvedev A. V., Kozlov A. S., Greshnevikov K. V., Spun fibers and their description within the Jones formalism in analyzing the practical fiber-optic circuits, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 198–214. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16416

Введение

Совершенствование волоконно-оптических технологий способствовало активному развитию различных видов специализированных оптических волокон. Одним из направлений в этой области стала разработка уникального класса волокон spun-типа (*англ.* spun – скрученный), которые обладают специфической внутренней структурой анизотропии. Такие волокна имеют такую же внутреннюю структуру, как и волокна с линейной анизотропией, однако при смещении вдоль продольной оси волокна направление поляризационных осей претерпевает регулярное вращение. Такая специфика достигается путем кручения заготовки с двулучепреломляющей структурой (ДЛП-структура) при вытяжке волокна.

Тип собственных поляризационных мод такого световода зависит от соотношения двух ключевых параметров в получаемой структуре волокна. Первый параметр – V_L, рад/м, – это погонное приращение разности фаз линейных поляризационных мод локального участка волокна, которое характеризует линейную анизотропию, вызванную наведенной при изготовлении поперечной деформацией сердцевины. Второй – V_α, рад/м, – это погонная скорость продольного вращения направления поляризационных осей.

В зависимости от достигнутого отношения V_α/V_L собственные моды spun-волокна могут иметь разный характер, но важно отметить, что с ростом значения V_α/V_L собственные моды spun-волокна стремятся к ортогональным циркулярным поляризациям [1].

При этом известны spun-волокна двух типов: низкого (LoBi) и высокого (HiBi) двулучепреломления.

Первый тип характерен тем, что высокое значение отношения V_α/V_L реализуется ввиду формирования низкого значения V_L. Эти волокна изготавливаются из заготовок без ДЛП-структуры с кручением при вытяжке и имеют собственные поляризационные моды с достаточно малой разностью фаз [2 – 4]. При ограниченной длине и слабых изгибах они функционируют как изотропный оптический световод, сохраняющий состояние поляризации входного излучения. Волокна spun-LoBi используют, например, для усиления света в мощных волоконных лазерах с целью преодоления дрейфа состояния поляризации света в волокне из-за его нагрева при накачке [5, 6]. Однако эти волокна подвержены существенному влиянию наведенной анизотропии при изгибах и других внешних возмущениях волокна.

Второй тип – spun-HiBi-волокно, наоборот, имеет относительно высокое значение V_L и изготавливается на основе заготовок с существенной поперечной ДЛП-структурой путем быстрого вращения заготовки при вытяжке волокна [7]. Благодаря относительно высокому отношению V_α/V_L, эти волокна также имеют собственные поляризационные моды, близкие к циркулярно-поляризованным [8], и при этом собственная анизотропия таких волокон слабо искажается при изгибах, сжатиях и других воздействиях. Волокна второго типа используются для разных целей, например, создания чувствительного элемента высокоточных волоконно-оптических датчиков тока [9 – 12]. Такое применение можно рассматривать как один из перспективных, широко известных и исследуемых вариантов.

Интерес к применению spun-волокон, особенно высокого двулучепреломления, вызван их потенциальной возможностью сохранять циркулярно-поляризованные моды. Однако такие собственные поляризационные моды соответствуют лишь предельному случаю при повышении значения V_α/V_L. На практике, в силу ряда причин, это отношение ограничено, поэтому даже без учета внутренних флуктуаций структуры, возникших при изготовлении и наведенных при укладке волокна, собственные поляризационные моды реальных spun-волокон только приближаются к циркулярным и могут заметно отличаться от идеализированного варианта.

Анализу поляризационных свойств реальных spun-волокон посвящено много работ [1, 4, 8, 10, 12 – 15]. Однако указанные исследования направлены, как правило, на анализ сложных механизмов регулярного и случайного преобразования поляризации света в процессе его распространения в неоднородной анизотропной структуре волокна и базируются на применении формализма связи мод и на уравнениях связанных волн [4, 10, 12, 13]. В ряде работ рассматривались и модели формирования матрицы Джонса spun-волокна, причем как дифференциальных матриц участка, так и результирующей интегральной матрицы [1, 8, 14, 15]. Такие модели имеют сложную структуру в виде произведения матриц, и в них необходимо учитывать (даже при приведении к интегральной матрице) строгие значения V_α, V_L и длины волокна, которые обычно неизвестны. Кроме того, такие модели для матрицы Джонса spun-волокна не позволяют учесть влияние возможных флуктуаций параметров и анизотропии, наведенной внешними возмущениями волокна. Поэтому результаты таких исследований хотя и описывают свойства spun-волокон, но их трудно применять для анализа и моделирования работы практических устройств на основе этих волокон.

Цели данной работы – получить структуру матрицы Джонса реального spun-волокна в максимально простой интегральной форме без использования параметров внутренней структуры волокна, исходя лишь из условия малого отличия поляризационных мод такого волокна от идеализированного представления, и проанализировать свойства полученной матрицы.

Именно такой вариант матрицы Джонса spun-волокна эффективен при анализе и моделировании устройств на основе этих волокон; кроме того, он весьма полезен, чтобы изучать влияние несовершенств (отличия реального spun-волокна от идеализированного) на работу этих устройств.

Матрица Джонса идеализированного spun-волокна

Прежде всего, необходимо учитывать, что в научной литературе есть разные варианты определения поляризованной волны с правым или левым направлением вращения, а также разные варианты учета фаз компонент в векторах Джонса и, как следствие, в матрицах Джонса. В дальнейшем анализе важно понимание этих особенностей, поэтому в Приложении (дано в конце статьи) приведены те уточнения, которых мы придерживаемся.

Как было отмечено выше, в идеализированном представлении spun-волокна его поляризационные моды принято считать циркулярными. Устройство с циркулярными собственными векторами в линейном декартовом базисе векторов Джонса описывается матрицей поворота. Следовательно, будем полагать, что матрица Джонса идеализированного spun-волокна имеет вид

$$\mathbf{M}_0 = \begin{bmatrix} \cos(\varphi/2) & \sin(\varphi/2) \\ -\sin(\varphi/2) & \cos(\varphi/2) \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Важно подчеркнуть, что представление об идеализированном spun-волокне, описываемом матрицей поворота, не связано с представлением о spun-волокне с идеальной структурой, в которой введен регулярный поворот направления осей линейной анизотропии. В такой структуре, даже с регулярными параметрами без флуктуаций, вид матрицы будет отличаться от представленного вида (1). Идеализированное spun-волокно, описываемое матрицей поворота, подразумевает именно идеализацию представления о преобразовании состояния поляризации света в таком волокне, когда желательно иметь в оптической схеме элемент с циркулярно-поляризованными собственными модами.

При уточняющих условиях, которые описаны в Приложении, матрица (1) поворачивает азимут состояния поляризации на угол $\varphi/2$ по часовой стрелке при наблюдении навстречу направлению распространения волны. При этом здесь принята во внимание разность фаз собственных мод φ, но не включен общий набег фазы Φ собственных волн, который нетрудно учесть через введение множителя $e^{-j\Phi}$, хотя этот множитель и не нужен для рассмотрения только преобразования состояния поляризации света. С этой точки зрения матрица (1) относится к классу специальных унитарных матриц, имеющих определитель, равный единице.

Собственные векторы $\mathbf{J}_{01}$ и $\mathbf{J}_{02}$ матрицы (1), соответствующие собственным числам $\lambda_1 = e^{j\varphi/2}$ и $\lambda_2 = e^{-j\varphi/2}$ (здесь и далее φ полагается положительной величиной), соответствуют волнам с правой и левой циркулярной поляризацией, которые обычно записывают в следующем виде [16, 17]:

$$\mathbf{J}_{01} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ j \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_{02} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -j \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Согласно принятым правилам, векторы $\mathbf{J}_{01}$ и $\mathbf{J}_{02}$ для матрицы (1) относятся соответственно к быстрой и медленной поляризационным модам идеализированного spun-волокна.

Здесь важно отметить, что можно представить альтернативный вариант идеализированного spun-волокна, которое поворачивает состояние поляризации света, прошедшего через волокно, против часовой стрелки. На практике это задается направлением вращения заготовки при вытяжке. Такой вариант идеализированного волокна будет описываться матрицей $\mathbf{M}_0' = \mathbf{M}_0^T$, которая также имеет собственные векторы (2), но первый будет соответствовать медленной моде, а второй – быстрой. В целом, если нужно рассматривать этот случай, то все приведенные далее выражения можно использовать, если производить замену φ на $-\varphi$ (при этом опять подразумевается, что φ – положительная величина).

Матрица Джонса реального spun-волокна

Реальные spun-волокна не соответствуют идеализированному представлению и описываются матрицей Джонса, отличной от матрицы поворота. При этом есть принципиальное отличие от волокон с линейной анизотропией (*англ.* polarization-maintaining (PM) fiber), в которых неидеальность волокна связана с флуктуациями величины и направления деформаций сердцевины, возникшими еще при изготовлении волокна или наведенными последующими внешними возмущениями.

Spun-волокно с регулярным вращением ориентации поляризационных осей отличается от указанного выше идеализированного представления даже без флуктуаций параметров анизотропии, поскольку циркулярные собственные поляризации достигаются только в случае предельного значения отношения параметров волокна, которых невозможно добиться на практике. Собственные и наведенные флуктуации параметров анизотропии дополнительно искажают итоговые поляризационные свойства волокна, но не являются основной причиной отличия от идеализированного представления.

С целью формирования относительно простого представления интегральной матрицы Джонса для отрезка реального spun-волокна, мы предлагаем использовать лишь условие слабого отличия поляризационных свойств такого волокна от идеализированного представления, т. е. слабого отличия собственных состояний поляризации от циркулярных.

При этом мы будем полагать, что spun-волокно остается элементом с фазовой анизотропией и описывается унитарной матрицей Джонса. Это обстоятельство можно обосновать малыми потерями оптической мощности в волокнах относительно небольшой длины (на практике обычно используются spun-волокна длиной до нескольких десятков метров), что позволяет пренебречь и возможным дихроизмом. Также не будем учитывать общий набег фаз Φ собственных мод, а значит будем рассматривать специальную унитарную матрицу.

С учетом вышеизложенного, матрица Джонса реального spun-волокна должна соответствовать матрице эллиптической фазовой пластинки, собственные векторы которой близки к векторам (2) для круговых поляризаций.

Ввиду важности свойств собственных векторов матрицы оптического элемента, сначала рассмотрим свойства собственных векторов, соответствующих условию близости к векторам (2). В общем случае в представлении через основные параметры эллипса поляризации (угол эллиптичности ε и азимут Θ) два ортогональных собственных вектора Джонса в декартовом базисе обычно записывают в следующем виде [16, 18]:

$$\mathbf{J}_1 = \begin{bmatrix} \cos\Theta\cos\varepsilon - j\sin\Theta\sin\varepsilon \\ \sin\Theta\cos\varepsilon + j\cos\Theta\sin\varepsilon \end{bmatrix},\ \mathbf{J}_2 = \begin{bmatrix} -\sin\Theta\cos\varepsilon + j\cos\Theta\sin\varepsilon \\ \cos\Theta\cos\varepsilon + j\sin\Theta\sin\varepsilon \end{bmatrix}, \tag{3}$$

где параметры ε и Θ заданы непосредственно для вектора $\mathbf{J}_1$, а вектор $\mathbf{J}_2$ получен как ортогональный к $\mathbf{J}_1$.

Формат (3) задает нормализованные векторы с единичной длиной, а в общем случае ортогональные векторы записываются с точностью до постоянного комплексного множителя, т. е. они могут иметь разные величины как длины, так и начальной фазы.

Полезно рассмотреть переход к идеализированному случаю с циркулярными поляризациями, для чего необходимо принять значение $\varepsilon = \pi/4$. Тогда векторы (3) преобразуются к виду

$$\mathbf{J}_1 = \frac{e^{-j\Theta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ j \end{bmatrix},\ \mathbf{J}_2 = \frac{je^{j\Theta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -j \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Отличие полученных выражений (4) от вида (2) заключается только в сомножителях, зависящих от азимута Θ; последние задают некоторые дополнительные аргументы комплексных векторов Джонса. Такие сомножители не влияют на форму эллипсов поляризации, которые в этом случае вырождены в круг и формально не имеют определенного азимута. Дополнительный сомножитель не меняет и единичную длину вектора, но, строго говоря, он все же имеет смысл, поскольку определяет начальное положение конца вектора напряженности электрического поля волны на круговом годографе. Таким образом, из анализа выражений (4) можно видеть, что распространенное представление векторов циркулярных поляризаций (2) формально соответствует $\varepsilon = \pi/4$ и $\Theta = 0$.

Допустим, что собственное состояние поляризации мало отличается от циркулярной поляризации; это характеризуется углом эллиптичности $\varepsilon = \pi/4 - \delta$, где отклонение δ предполагается малым ($\delta << 1$). Тогда в общей форме векторов Джонса (3) можно применить приближения для тригонометрических функций и при сохранении составляющих только первого порядка малости можно использовать приближенные равенства:

$$\sin\left(\frac{\pi}{4} - \delta\right) \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \delta),\ \ \cos\left(\frac{\pi}{4} - \delta\right) \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \delta). \tag{5}$$

Если подставить выражения (5) в форму (3) и применить известные тригонометрические преобразования, то получим собственные векторы матрицы неидеального spun-волокна в следующем виде:

$$\mathbf{J}_1 = \frac{e^{-j\Theta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 + \delta\cdot e^{j2\Theta} \\ j\left(1 - \delta\cdot e^{j2\Theta}\right) \end{bmatrix},\ \mathbf{J}_2 = \frac{e^{j\Theta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} j\left(1 - \delta\cdot e^{-j2\Theta}\right) \\ 1 + \delta\cdot e^{-j2\Theta} \end{bmatrix}. \tag{6}$$

Состояния поляризации, описываемые векторами (6), с учетом малости δ, являются эллиптическими, хотя и близкими к круговым. Здесь Θ имеет уже понятный смысл – направление большой оси эллипса поляризации и может иметь произвольное значение в полном диапазоне изменения азимута [0; π]. Рассмотренные собственные состояния поляризации spun-волокна демонстрируются на рис. 1, где можно видеть смещение состояния поляризации вектора $\mathbf{J}_1$ от идеализированного представления (от точки *A* к некоторой точке *B*) на сфере Пуанкаре. Вектору $\mathbf{J}_2$ соответствуют диаметрально противоположные точки сферы.

Для получения матрицы Джонса реального spun-волокна $\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}}$ можно предложить два пути. Первый – использовать общую форму матрицы фазовой анизотропии, выраженную через собственные числа λ_1, λ_2 и собственные векторы [18, 19]:

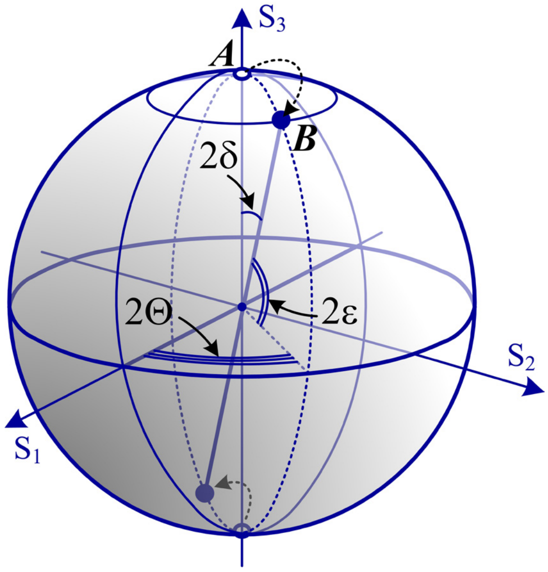


Рис. 1. Смещение точки собственного состояния поляризации spun-волокна на сфере Пуанкаре при учете его реальных характеристик:

точка *A* соответствует поляризации с вектором Джонса $\mathbf{J}_1$ для случая идеализированного spun-волокна, точка *B* – для случая реального spun-волокна; Θ, ε – параметры азимута и угла эллиптичности; 2δ– угловое отклонение собственного состояния поляризации от точки циркулярного состояния поляризации

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y} - \mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2x}} \begin{bmatrix} \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}\lambda_1 - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}\lambda_2 & -(\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2x} \\ (\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2y} & \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}\lambda_2 - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}\lambda_1 \end{bmatrix}, \tag{7}$$

где $\mathbf{j}_{1x}$, $\mathbf{j}_{1y}$ – компоненты вектора Джонса $\mathbf{J}_1$; $\mathbf{j}_{2x}$, $\mathbf{j}_{2y}$ – компоненты вектора $\mathbf{J}_2$.

Если рассматривать специальную унитарную матрицу, которая описывает систему без потерь и имеет собственные значения $\lambda_1 = e^{j\varphi/2}$ и $\lambda_2 = e^{-j\varphi/2}$, то из общей формы (7) получим:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y} - \mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2x}} \begin{bmatrix} \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}e^{j\varphi/2} - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}e^{-j\varphi/2} & -j2\mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2x}\sin(\varphi/2) \\ j2\mathbf{j}_{1y}\mathbf{j}_{2y}\sin(\varphi/2) & \mathbf{j}_{1x}\mathbf{j}_{2y}e^{-j\varphi/2} - \mathbf{j}_{2x}\mathbf{j}_{1y}e^{j\varphi/2} \end{bmatrix}. \tag{8}$$

Искомую матрицу реального spun-волокна $\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}}$, которая имеет собственные векторы (6), можно получить, если подставить выражения (6) в форму (8).

Другой путь получения искомой матрицы $\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}}$ связан с использованием выражения для матрицы Джонса произвольной эллиптической фазовой пластинки:

$$\mathbf{M}_{\mathrm{EPP}} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + j\cos 2\Theta\cdot\cos 2\varepsilon\cdot\sin\frac{\varphi}{2} & (\sin 2\varepsilon + j\sin 2\Theta\cdot\cos 2\varepsilon)\sin\frac{\varphi}{2} \\ -(\sin 2\varepsilon - j\sin 2\Theta\cdot\cos 2\varepsilon)\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} - j\cos 2\Theta\cdot\cos 2\varepsilon\cdot\sin\frac{\varphi}{2} \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Выражение (9) было получено в работе [20] через подстановку в форму (8) выражений для ортогональных векторов Джонса, записанных в общей форме (3). Чтобы получить матрицу $\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}}$, нужно в матрице (9) учесть $\varepsilon = \pi/4 - \delta$ и использовать упрощения (5).

В обоих случаях в результате получим матрицу вида

$$\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + j2\delta\cos 2\Theta\cdot\sin\frac{\varphi}{2} & (1 + j2\delta\sin 2\Theta)\cdot\sin\frac{\varphi}{2} \\ -(1 - j2\delta\sin 2\Theta)\cdot\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} - j2\delta\cos 2\Theta\cdot\sin\frac{\varphi}{2} \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Следует обратить внимание, что определитель Δ матрицы (10) выражается как

$$\Delta = 1 + 4\delta^2 \cdot \sin^2(\varphi/2)$$

и что он вещественный, но отличен от единицы.

Чтобы получить строгое соответствие нормальной унитарной матрице, можно ввести в выражение (10) множитель 1/Δ, но при практических расчетах целесообразно пренебречь поправкой второго порядка по малому параметру δ и использовать матрицу (10) без дополнительных множителей.

Как было указано выше, для идеализированного представления волокна можно было бы выбрать не матрицу поворота $\mathbf{M}_0$, заданную формулой (1), а матрицу $\mathbf{M}_0' = \mathbf{M}_0^T$ (формально это можно обосновать заменой φ на −φ), поворачивающую азимут поляризации против часовой стрелки. Оба варианта равноправны, поскольку задаются направлением вращения заготовки волокна при вытяжке. В этом случае правая циркулярная поляризация будет медленной модой матрицы, а левая – быстрой.

Выражения для собственных векторов $\mathbf{J}_1'$ и $\mathbf{J}_2'$ матрицы $\mathbf{M}'_{\mathrm{SPUN}}$ можно получить, если в форме (3) положить $\varepsilon = -\pi/4 + \delta$, поскольку вектор $\mathbf{J}_1'$ близок к левой циркулярной поляризации. В результате получим следующие выражения:

$$\mathbf{J}_1' = \frac{e^{j\Theta}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 + \delta \cdot e^{-j2\Theta} \\ j\left(\delta \cdot e^{j2\Theta} - 1\right) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_2' = \frac{e^{-j\Theta}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} j\left(\delta \cdot e^{j2\Theta} - 1\right) \\ 1 + \delta \cdot e^{j2\Theta} \end{bmatrix}, \qquad (11)$$

$$\mathbf{M}'_{\mathrm{SPUN}} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + j2\delta\cos 2\Theta \cdot \sin\frac{\varphi}{2} & -\left(1 - j2\delta\sin 2\Theta\right) \cdot \sin\frac{\varphi}{2} \\ \left(1 + j2\delta\sin 2\Theta\right) \cdot \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} - j2\delta\cos 2\Theta \cdot \sin\frac{\varphi}{2} \end{bmatrix}. \qquad (12)$$

Из выражения (12) видно, что матрица $\mathbf{M}'_{\mathrm{SPUN}}$, как и следовало ожидать, соответствует матрице, транспонированной к $\mathbf{M}_{\mathrm{SPUN}}$, аналогично матрицам $\mathbf{M}_0'$ и $\mathbf{M}_0$ для идеализированного spun-волокна.

Особенности применения матрицы Джонса реального spun-волокна при анализе и моделировании оптоволоконных схем

Представление матрицы Джонса реального spun-волокна можно использовать для анализа и моделирования систем, содержащих такие волокна. Как правило, подобный анализ нацелен на выяснение влияния неидеальности волокон и других поляризационных элементов на функционирование системы в целом. При этом модели, получаемые в рамках формализма Джонса, обычно содержат много параметров, характеризующих поляризационные рассогласования, которые надо варьировать при аналитических или численных расчетах. Поэтому полученное выражение (10), представляющее собой простой явный вид матрицы Джонса реального spun-волокна и учитывающее слабое отличие собственных поляризационных мод волокна от их идеализированного представления с помощью малого параметра δ, является привлекательным для указанных расчетов.

Матрица (10) содержит три параметра: δ, Θ и φ; все они могут влиять на преобразование состояния поляризации при прохождении света через spun-волокно и, как результат, на формирование сигналов в оптической схеме. Поэтому при проведении анализа или численных расчетов надо определять, какие значения параметров использовать.

Малый параметр δ задает количественную меру отклонения реального spun-волокна от идеализированного представления. Это отклонение может быть связано как с ограниченным значением отношения V_α/V_L, которое обеспечивают при создании волокна, так и с флуктуациями параметров, возникающими при изготовлении или укладке волокна. В результате конкретное значение δ для реальных волокон бывает трудно предсказать. Наиболее целесообразный подход для проведения анализа – это определение некоторого предельного значения $\delta_{\max}$ для рассматриваемого волокна. Такое значение можно получить отдельным теоретическим рассмотрением конкретной структуры spun-волокна или определить эмпирически. Далее в расчетах следует рассматривать влияние рассогласований через варьирование параметра δ в диапазоне от 0 до δ_{max}.

Азимут собственных состояний в некотором ориентационном базисе, который зависит от того, с какими элементами и как стыкуется spun-волокно, в общем случае приходится считать неизвестным, неконтролируемым и допускать любое возможное значение параметра Θ в диапазоне от 0 до π.

Разность фаз поляризационных мод φ, формируемая при прохождении света через волокно, также оказывается фактически неизвестным и неконтролируемым параметром. Даже если ключевые параметры spun-волокна известны, то в случае spun-волокна высокого двулучепреломления достаточно большой длины (от единиц метров и более) разность фаз собственных мод трудно рассчитать или точно определить; с учетом же флуктуаций параметров и возможного существенного изменения температуры, значение φ фактически может оказаться произвольным в диапазоне от 0 до 2π. Поэтому при анализе и расчетах его также следует варьировать в указанном диапазоне.

В части обсуждения разности фаз φ стоит сделать еще одно важное замечание. Уже отмечалось, что волокна spun-HiBi чаще всего применяют в волоконно-оптических датчиках как чувствительные элементы. Самым распространенным примером использования таких волокон служат волоконно-оптические датчики тока, где предполагается, что вследствие эффекта Фарадея, в spun-волокне, обмотанном вокруг проводника с током, изменяется разность фаз между двумя циркулярно-поляризованными ортогональными модами. Таким образом, при анализе подобных схем следует иметь в виду, что разность фаз φ должна содержать и компоненту, наведенную измеряемым воздействием. При этом невзаимная анизотропия, наведенная измеряемым магнитным полем как следствие эффекта Фарадея, является циркулярной. Если бы spun-волокно соответствовало идеализированному представлению и описывалось матрицей $\mathbf{M}_0$ (или $\mathbf{M}_0'$), то, очевидно, при моделировании разность фаз φ следовало бы задавать в виде

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi(t),$$

где φ_0 – квазистационарная компонента разности фаз между циркулярно-поляризованными модами в волокне.

Величина φ_0, как указано выше, фактически может быть любой в диапазоне $0 - 2\pi$. Но поскольку реальное spun-волокно априори отличается от идеализированного представления и собственные моды такого волокна не строго циркулярны, задание разности фаз φ в виде вышеуказанной суммы будет приближенным. При аналитическом изучении и численном моделировании сигналов в измерительных схемах со spun-волокном такое приближение на практике может быть вполне приемлемым.

Экспериментальная часть

Для анализа схем со spun-волокном на основе полученного вида матрицы Джонса необходимо оценить возможный диапазон значений основного параметра, характеризующего отклонение волокна от идеализированного представления – параметра δ. Такую оценку можно сделать как на основе дополнительных исследований факторов анизотропии волокна, так и экспериментально. Далее представлены результаты экспериментов, позволяющих оценить параметр δ для конкретного spun-волокна и наглядно дополняющих представленный выше анализ.

Для измерений мы использовали тот факт, что если при распространении через элемент с фазовой анизотропией (например, через анизотропное оптическое волокно) возбуждены две поляризационные моды, то при изменении разности фаз φ мод на 2π эволюция состояния поляризации на выходе из элемента на сфере Пуанкаре образует окружность [17, 19]. Изменение φ приводит к вращению сферы вокруг оси, которая задается точками собственных состояний поляризации, а угловой радиус R окружности определяется соотношением амплитуд поляризационных мод. Поэтому экспериментальное формирование и регистрация такой эволюции, а также последующий ее анализ с определением параметров Θ_0 и ε_0 центра малой окружности сферы позволяет измерять собственные состояния поляризации элемента. На рис. 2,*a*,*b* поясняется данный подход и приводится схема экспериментальной установки для его реализации.

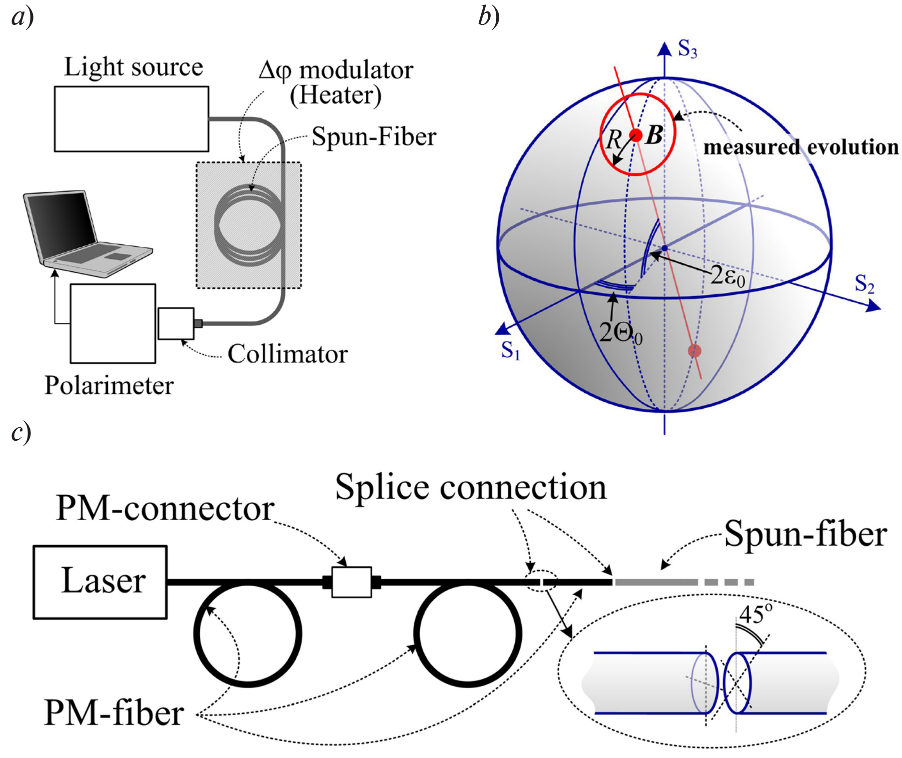


Рис. 2. Схема эксперимента (*a*) и ее уточняющий фрагмент (*c*), который показывает прохождение света к входу в тестируемое spun-волокно, а также эволюция состояния поляризации на сфере Пуанкаре, регистрируемая при измерениях (*b*)

Ключевым вопросом, определяющим возможность корректной реализации указанного подхода к измерению собственных состояний поляризации волокна, является метод организации изменения разности фаз φ. Мы использовали для такого изменения нагрев волокна. В отличие от других воздействий, меняющих оптическую длину волокна, таких как продольное натяжение, нагрев в меньшей степени влияет на внутреннюю структуру волокна, определяющую его анизотропию. Кроме того, этот способ может быть использован при относительно большой длине волокна.

Тем не менее, использованный подход к измерениям имеет свои особенности.

Во-первых, нагрев волокна все-таки может приводить не только к изменению разности фаз φ. Изменение температуры, вследствие различных механизмов, может менять соотношение линейной и круговой анизотропии и преобразовывать характер собственных мод. Это должно приводить к более сложной эволюции состояния поляризации на выходе волокна, поскольку точка на сфере Пуанкаре будет двигаться по окружности в условиях изменения как центра окружности, так и ее радиуса. Последнее связано с тем, что если меняются собственные состояния поляризации волокна, то при учете фиксированных параметров излучения источника, будет меняться и соотношение возбуждаемых поляризационных мод. Однако процесс изменения параметра φ с повышением температуры волокна должен происходить быстрее, чем изменение угловых параметров собственных мод. Мы полагаем, что если при измерениях наблюдается фрагмент эволюции состояния поляризации, хорошо соответствующий малому кругу сферы Пуанкаре, то это позволяет судить и о соответствующих этому фрагменту значениях ε_0 и Θ_0 собственных состояний поляризации волокна. В результате проведения эксперимента наши измерения могут показать не только параметры собственных мод реального волокна, но и обнаружить их флуктуации при изменении внешних условий.

Во-вторых, азимут регистрируемых поляриметром точек определяется положением оси поляриметра, которая устанавливается фактически произвольно относительно торца волокна. Поэтому абсолютное значение измеренного азимута Θ_0 поляризационной моды не будет информативным (для второй моды азимут будет смещен на π/2). Однако при анализе spun-волокна, как рассмотрено выше, отклонение волокна от идеализированного представления характеризуется не азимутом, а параметром неидеальности δ, который связан только с тем, насколько угол эллиптичности поляризационной моды ε_0 отличается от π/4. При этом все же если в процессе измерений значение Θ_0 будет изменяться, то эти изменения действительно будут характеризовать изменения собственных поляризационных мод.

В экспериментах использовалось spun-волокно производства компании Fibercore (модель SHB1500(8.9/125)), длина тестируемого отрезка составляла 80 м, волокно было намотано на стандартную катушку диаметром 16 см. Структурная схема источника излучения, к которому подсоединялось тестируемое волокно, представлена на рис. 2,*c*. Использовался DFB-лазер от компании Optilab (модель DFB 1550 PM-20, длина волны 1550 нм, выходная мощность 9,5 мВт), который имел волоконный вывод (PM-волокно с разъемом APC-типа). Далее к выводу лазера через разъемное соединение был подключен отрезок PM-волокна типа Bow-Tie производства компании Fibercore (модель HB1250, длина биений поляризационных мод – 3,28 мм). В конце подводящего волокна была сформирована короткая волоконная секция (длиной примерно 0,82 мм), повернутая на 45° относительно осей основного отрезка, и далее уже было приварено spun-волокно. Данная секция выполняла роль четвертьволновой фазовой пластики.

При прохождении линейно-поляризованного излучения от выхода лазера через подводящее PM-волокно и четвертьволновую пластинку, повернутую на 45°, должно сформироваться циркулярно-поляризованное излучение, и в идеализированном представлении spun-волокна в нем должна возбуждаться одна поляризационная мода. Но поскольку реальное spun-волокно имеет поляризационные моды, отличные от циркулярных, и сформированная волоконная фазовая пластинка не является идеальной четвертьволновой, в тестируемом волокне возбуждались фактически две поляризационные моды в неравном соотношении амплитуд. Это как раз и соответствовало условиям, которые требовались для проведения измерений: обеспечивалась возможность непосредственно контролировать соответствие фрагментов эволюции состояния поляризации круговым траекториям на сфере Пуанкаре и измерять параметры поляризационных мод волокна.

Состояние поляризации регистрировалось поляриметром PAX1000IR2 компании Thorlabs (США), который позволял измерять азимут и угол эллиптичности состояния поляризации с точностью 0,25°. Для подключения волокна к поляриметру использовался коллиматор.

В ходе эксперимента тестируемое волокно медленно (за 50 мин) нагревалось на 40°С. Эволюция регистрируемого состояния поляризации излучения на выходе волокна, вызванная нагревом, показана на рис. 3,*a*. Видно, что при нагреве траектория движения точки выходного состояния поляризации на сфере Пуанкаре образует много витков, охватывающих полюс сферы. Радиус витков заметно меняется, а их форма не всегда соответствует окружностям, что вполне объяснимо причинами, указанными выше.

Тем не менее, многие витки в траектории движения состояния поляризации хорошо соответствуют окружностям. Такие фрагменты иллюстрируют ситуацию, когда при стабильных собственных состояниях поляризации волокна происходит изменение разности фаз φ. Для примера на рис. 3,*b* показаны три фрагмента наблюдаемой эволюции состояния поляризации на выходе spun-волокна, которые хорошо согласуются с окружностями на сфере. Это видно по соответствию между точками, измеренными поляриметром, и окружностями на сфере, аппроксимирующими эти точки. Такие фрагменты позволяют определять параметры собственных поляризационных мод на данном участке траектории. В таблице приведены значения параметров окружностей для трех фрагментов, показанных на рис. 3,*b*.

Дополнительно измеренная эволюция состояния поляризации позволяет оценить усредненную нормированную чувствительность к температуре разности фаз φ поляризационных мод. Эта чувствительность составила примерно 0,02 рад/(м·°С).

Изменение значения *R* (см. таблицу) означает, что при изменении параметров собственных состояний поляризации меняется и соотношение их возбуждения излучением на входе волокна. Из примеров с тремя фрагментами зафиксированной траектории на сфере Пуанкаре видно, что наиболее существенно меняется азимут Θ_0 поляризационного эллипса собственных мод (почти на 20°). При этом угол эллиптичности ε_0, характеризующий

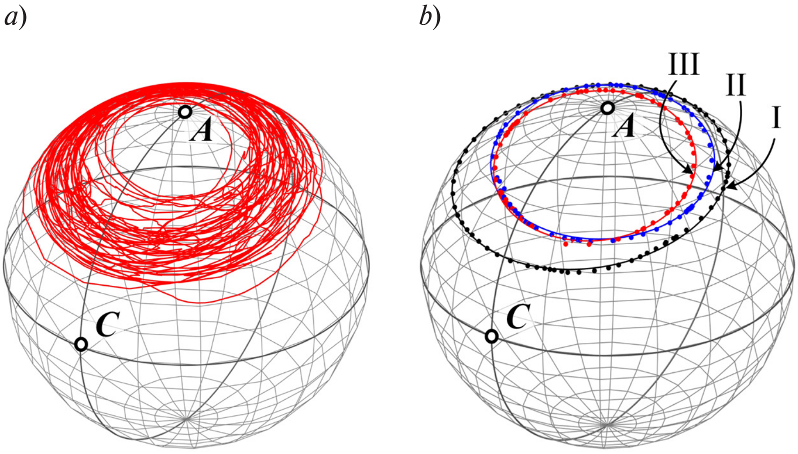


Рис. 3. Полная эволюция состояния поляризации (*a*) и фрагменты эволюции I, II и III (*b*) на выходе из spun-волокна, изображенные на сферах Пуанкаре.

Сплошными линиями показана аппроксимация точек фрагментов окружностями на сфере. Точки *A* и *C* соответствуют правой круговой ($\varepsilon = 45°$) и линейной вдоль оси X ($\Theta = \varepsilon = 0$) поляризациям, соответственно

Таблица

Параметры окружностей, аппроксимирующих измеренные точки фрагментов эволюции состояния поляризации на сфере Пуанкаре (см. рис. 3,*b*)

Угловой параметр	Значение параметра, град, для фрагмента		
	I	II	III
Радиус R	48,4	36,9	32,8
Азимут Θ_0	2,9	15,7	12,5
Угол эллиптичности ε_0	37,6	37,3	35,2

отличие волокна от идеализированного случая, меняется существенно меньше. Если пересчитать величину ε_0 в параметр δ, то, согласно данным таблицы, среднее значение δ составляет примерно 8,3°, а разность между максимальным и минимальным значениями – 2,4°.

Таким образом, результаты измерений показывают, что для тестируемого волокна можно сделать вполне определенные оценки для основного параметра (δ), характеризующего его неидеальность и необходимого для анализа оптических схем с использованием полученной матрицы Джонса spun-волокна.

Заключение

В рамках модели фазовой анизотропии получено выражение для матрицы Джонса реального spun-волокна. Выражение учитывает слабое отклонение свойств волокна от идеализированного случая с собственными состояниями поляризации в виде правой и левой круговых поляризаций. Для этого используется малый параметр δ, учитывающий отклонение угла эллиптичности собственного состояния поляризации от $\pi/4$. Полученное выражение можно использовать для описания и анализа оптических схем, содержащих волокна spun-типа, на основе формализма Джонса.

Результаты предложенных и проведенных экспериментов по измерению параметров собственных состояний поляризации волокна иллюстрируют отклонение реального spun-волокна от идеализированного представления и показывают отличие собственных состояний поляризации от круговых. При этом для использованной модели волокна измерения позволили оценить значение параметра неидеальности δ в диапазоне примерно 7° – 10°.

Приложение

Вариативность представления состояния поляризации в формализме Джонса

Хотя представление поляризованных волн считается давно устоявшимся и формализм Джонса широко применяется, чтобы описывать преобразования состояния поляризации, к сожалению, в научной литературе есть разночтения по некоторым деталям такого описания. В целом, выбор тех или иных используемых вариантов не влияет на получение правильного результата. Однако, учитывая важность этих особенностей для материала данной статьи, целесообразно пояснить некоторые моменты используемых нами подходов, чтобы избежать путаницы и возможных вопросов.

Первый аспект, по которому в литературе можно видеть разночтения, – это учет фаз при записи векторов Джонса и соответствие медленной и быстрой собственных поляризационных мод собственным числам матрицы Джонса.

Рассмотрим собственные поляризационные моды некоторого оптического элемента с фазовой анизотропией. Пусть для первой моды X-компонента поля на входе оптического элемента имеет вид

$$E_x^{\text{in}} = A_1\cos(\omega t + \varphi_0),$$

где ω, φ_0 – круговая частота и начальная фаза колебания.

Y-компонента с начальной фазой, смещенной на $\delta\varphi$, имеет вид

$$E_y^{\text{in}} = A_2\cos(\omega t + \varphi_0 + \delta\varphi).$$

Тогда собственные векторы Джонса $\mathbf{J}_1^{\text{in}}$ и $\mathbf{J}_2^{\text{in}}$ (в декартовом базисе) запишутся следующим образом:

$$\mathbf{J}_1^{\text{in}} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 e^{j\delta\varphi} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_2^{\text{in}} = \begin{bmatrix} -A_2 e^{-j\delta\varphi} \\ A_1 \end{bmatrix}. \qquad (\text{П}1)$$

При этом второй вектор представлен так, чтобы он был ортогонален первому.

Векторы Джонса могут также включать общий множитель $\exp(j\varphi_0)$, однако его обычно опускают, поскольку он не влияет на форму и ориентацию поляризационного эллипса. В такой записи компоненты вектора содержат комплексные амплитуды, аргументы которых задаются как начальные фазы. При этом для вектора $\mathbf{J}_1^{\text{in}}$ в предположении $\delta\varphi > 0$ получается, что X-компонента вектора запаздывает относительно Y-компоненты.

При прохождении через оптический элемент с фазовой анизотропией в случае, когда поляризационно-независимые потери пренебрежимо малы, собственные моды приобретают только фазовую задержку, причем различную. Первая и вторая моды приобретают соответственно фазовые задержки Φ_1 и Φ_2:

$$\Phi_1 = n_1L/\lambda,\ \Phi_2 = n_2L/\lambda,$$

где L – геометрическая длина пути волн в оптическом элементе; λ – длина волны света; n_1, n_2 – эффективные показатели преломления для собственных поляризационных мод.

Если ввести средний показатель преломления n и разность Δn вида

$$n = (n_1 + n_2)/2,\ \Delta n = n_2 - n_1$$

(Δn характеризует анизотропию элемента), то можно записать фазовые задержки в виде

$$\Phi_1 = \Phi - \varphi/2,\ \Phi_2 = \Phi + \varphi/2,$$

где $\Phi = nL/\lambda$, $\varphi = \Delta nL/\lambda$.

Значение φ будет положительным, если $\Delta n > 0$. В таком случае первая мода распространяется быстрее и имеет меньшую фазовую задержку, а вторая распространяется медленнее и приобретает бóльшую фазовую задержку. Поэтому при $\varphi > 0$ первую и вторую моды логично называть «быстрой» и «медленной», соответственно.

С учетом введенных выше декартовых компонент первой моды на входе оптического элемента, на выходе их можно записать в виде

$$E_x^{\text{out}} = A_1\cos[\omega t + \varphi_0 - (\Phi - \varphi/2)],$$

$$E_y^{\text{out}} = A_2\cos[\omega t + \varphi_0 + \delta\varphi - (\Phi - \varphi/2)].$$

Аналогично компоненты второй моды на выходе оптического элемента получаются добавлением слагаемых $-(\Phi + \varphi/2)$ к фазе компонент на входе.

Нетрудно убедиться, что если векторы Джонса учитывают начальные фазы осцилляций поля, то связь входных ($\mathbf{J}_1^{\text{in}}$, $\mathbf{J}_2^{\text{in}}$) и выходных ($\mathbf{J}_1^{\text{out}}$, $\mathbf{J}_2^{\text{out}}$) векторов собственных мод должна иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_1^{\text{out}} &= e^{-j\Phi}\cdot\mathbf{M}\cdot\mathbf{J}_1^{\text{in}} = e^{-j\Phi}\cdot e^{j\varphi/2}\cdot\mathbf{J}_1^{in};\\ \mathbf{J}_2^{\text{out}} &= e^{-j\Phi}\cdot\mathbf{M}\cdot\mathbf{J}_2^{\text{in}} = e^{-j\Phi}\cdot e^{-j\varphi/2}\cdot\mathbf{J}_2^{\text{in}}.\end{aligned} \tag{П2}$$

В формулах (П2) введена матрица Джонса **M** оптического элемента, которая не учитывает средний набег фазы и представляет собой специальную унитарную матрицу с собственными числами

$$\lambda_1 = e^{j\varphi/2},\ \lambda_2 = e^{-j\varphi/2}.$$

Из приведенных рассуждений ясно, что если $\varphi > 0$, то векторы с собственными числами λ_1 и λ_2 относятся соответственно к быстрой и медленной модам анизотропного элемента.

Описанный вариант представления фаз в векторах и матрицах Джонса широко распространен в учебниках, монографиях и статьях [16, 17, 21]. Однако в литературе можно встретить и альтернативный подход записи фаз в векторах и матрицах Джонса [19]. В его основе фактически лежит представление гармонической волны, распространяющейся вдоль оси z с волновым числом k, через функцию $\cos(\omega t - kz)$. Тогда сдвиг фазы волны относительно нулевой начальной фазы можно интерпретировать как фазовую задержку вследствие запаздывания из-за прохождения некоторого пути. При этом в записи векторов и матриц Джонса учитываются не начальные фазы, а фазовые задержки, т. е. отрицательные изменения начальных фаз учитываются как положительные задержки и наоборот.

В таком представлении те же E_x^{in} и E_y^{in} можно записать как

$$E_x^{\text{in}} = A_1\cos[\omega t - (-\varphi_0)],\ \ E_y^{\text{in}} = A_2\cos[\omega t - (-\varphi_0 - \delta\varphi)],$$

где в круглых скобках теперь указаны фазовые задержки.

При этом векторы $\mathbf{J}_1^{\text{in}}$ и $\mathbf{J}_2^{\text{in}}$ будут уже записаны в виде

$$\mathbf{J}_1^{\text{in}} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 e^{-j\delta\varphi}\end{bmatrix},\quad \mathbf{J}_2^{\text{in}} = \begin{bmatrix} -A_2 e^{j\delta\varphi} \\ A_1\end{bmatrix}. \tag{П3}$$

Если же необходимо учесть фазу φ_0, то в запись (П3) нужно ввести общий фазовый множитель $\exp(-j\varphi_0)$. Компоненты E_x^{out} и E_y^{out} также не меняются, но выходные векторы теперь будут представлены в виде

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_1^{\text{out}} &= e^{j\Phi}\cdot\mathbf{M}\cdot\mathbf{J}_1^{\text{in}} = e^{j\Phi}\cdot e^{-j\varphi/2}\cdot\mathbf{J}_1^{\text{in}};\\ \mathbf{J}_2^{\text{out}} &= e^{j\Phi}\cdot\mathbf{M}\cdot\mathbf{J}_2^{\text{in}} = e^{j\Phi}\cdot e^{j\varphi/2}\cdot\mathbf{J}_2^{\text{in}}.\end{aligned} \tag{П4}$$

Здесь оптический элемент с фазовой анизотропией также представлен специальной унитарной матрицей **M** с такими же собственными числами $e^{j\varphi/2}$ и $e^{-j\varphi/2}$. Однако в этом представлении вектор с собственным числом $\lambda_1 = e^{j\varphi/2}$ соответствует медленной моде, а вектор с собственным числом $\lambda_2 = e^{-j\varphi/2}$ – быстрой (при $\varphi > 0$).

В данной статье мы придерживаемся первого варианта представления векторов Джонса, когда в них учитываются начальные фазы декартовых компонент, а не фазовые задержки.

Второй аспект, по которому существуют разночтения в литературе, это определение поляризованных волн с правым и левым направлениями вращения вектора напряженности электрического поля.

В большей части учебников и монографий [16, 22, 23] правополяризованной называют волну, у которой вектор напряженности электрического поля вращается по часовой стрелке, если смотреть навстречу направлению распространения волны. Соответственно, левополяризованная волна имеет вращение вектора напряженности электрического поля против часовой стрелки. В данной статье мы придерживаемся именно такого определения. Однако в литературе можно встретить противоположный вариант определения право- и левополяризованных волн [21].

Третий аспект, важный для данной статьи, — это вид записи векторов Джонса для правой и левой круговых поляризаций.

В соответствии с определением право- и левополяризованных волн, которого мы придерживаемся, нетрудно убедиться в следующем. Для правой круговой поляризации компонента E_x запаздывает относительно компоненты E_y на $\pi/2$. Например, при $E_x = A\cos(\omega t + \varphi_0)$ для правой круговой поляризации следует $E_y = -A\sin(\omega t + \varphi_0)$. Следовательно, начальная фаза Y-компоненты дополнительно увеличена на $\pi/2$. Для левой круговой поляризации, наоборот, компонента E_y запаздывает относительно компоненты E_x. Поэтому с учетом всех принятых нами условий векторы Джонса для правой и левой круговых поляризаций будут описываться векторами (2).

Тем не менее, важно отметить, что сопоставление векторов Джонса (2) с правой и левой круговыми поляризациями некоторыми исследователями в имеющейся литературе может быть противоположным, ввиду различий принятых договоренностей по правилам записи фаз в векторах и матрицах Джонса, а также определений право- и левополяризованного излучения. Так, в работе [21] использование альтернативного варианта векторов связано с альтернативным определением названий направления вращения, а в работе [19] это связано с альтернативным вариантом представления векторов Джонса с использованием фазовых задержек.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Liu Y., Song H.** Theoretical analysis on polarization characteristics of spun birefringent optical fiber based on an analytical Jones matrix model // Optik. 2021. Vol. 228. February. P. 166179.

2. **Barlow A. J., Ramskov-Hansen J. J., Payne D. N.** Birefringence and polarization mode-dispersion in spun single-mode fibers // Applied Optics. 1981. Vol. 20. No. 17. Pp. 2962—2968.

3. **Payne D. N., Barlow A. J., Ramskov-Hansen J. J.** Development of low- and high-birefringence optical fibers // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1982. Vol. 30. No. 4. Pp. 323—334.

4. **Polynkin P., Blake J.** Polarization evolution in bent spun fiber // Journal of Lightwave Technology. 2005. Vol. 23. No. 11. Pp. 3815—3820.

5. **Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., Kolosovskii A., Voloshin V., Vorob'ev I., Gumenyuk R., Chamorovskiy Y., Filippov V.** Active tapered double-clad fiber with low birefringence // Optics Express. 2021. Vol. 29. No. 11. Pp. 16506—16519.

6. **Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., Noronen T., Gumenyuk R., Kolosovskii A., Voloshin V., Vorob'ev I., Chamorovskii Y., Filippov V.** Large mode area double-clad ytterbium-doped spun tapered fiber // Journal of the Optical Society of America. B. 2021. Vol. 38. No. 12. Pp. F161—F169.

7. **Laming R. I., Payne D. N.** Electric current sensors employing spun highly birefringent optical fibers // Journal of Lightwave Technology. 1989. Vol. 7. No. 12. Pp. 2084—2094.

8. **Губин В. П., Исаев В. А., Моршнев С. К., Сазонов А. И., Старостин Н. И., Чаморовский Ю. К., Усов А. И.** Использование волоконных световодов типа Spun в датчиках тока // Квантовая электроника. 2006. Т. 36. № 3. С. 287—291.

9. **Müller G. M., Frank A., Yang L., Gu X., Bohnert K.** Temperature compensation of interferometric and polarimetric fiber-optic current sensors with spun highly birefringent fiber // Journal of Lightwave Technology. 2019. Vol. 37. No. 18. Pp. 4507—4513.

10. **Пржиялковский Я. В., Губин В. П., Старостин Н. И., Моршнев С. К., Сазонов А. И.** Регистрация импульсов электрического тока волоконно-оптическим датчиком с использованием spun-световодов // Квантовая электроника. 2018. Т. 48. № 1. С. 62—69.

11. **Temkina V., Medvedev A., Mayzel A.** Research on the methods and algorithms improving the measurements precision and market competitive advantages of fiber optic current sensors // Sensors. 2020. Vol. 20. No. 21. P. 5995.

12. **Peng N., Huang Y., Wang S., Wen T., Liu W., Zuo Q., Wang L.** Fiber optic current sensor based on special spun highly birefringent fiber // IEEE Photonics Technology Letters. 2013. Vol. 25. No. 17. Pp. 1668–1671.

13. **Wang Y., Xu C.-Q., Izraelian V.** Characterization of spun fibers with millimeter spin periods // Optics Express. 2005. Vol. 13. No. 10. Pp. 3841–3851.

14. **Hu H., Huang J., Huang Y, Xia L., Yu J.** Modeling of the birefringence in spun fiber // Optics Communications. 2020. Vol. 473. 15 October. P. 125919.

15. **Yao P., Chen X., Hao P., Xiao H., Ding Z., Liu T., Yao X. S.** Introduction and measurement of the effective Verdet constant of spun optical fibers // Optics Express. 2021. Vol. 29. No. 15. Pp. 23315–23330.

16. **Аззам Р., Башара Н.** Эллипсометрия и поляризованный свет. Пер. с англ. М.: Мир, 1981. 584 с.

17. **Collett E.** Polarized light in fiber optics. Bellingham, Washington, USA: SPIE Press, 2003. 540 p.

18. **Ищенко Е. Ф., Соколов А. Л.** Поляризационная оптика. 3-е изд., испр. и доп. М.: Физматлит, 2019. 576 с.

19. **Huard S.** Polarization of light. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Inc., 1997. 352 p.

20. **Темкина В. С., Лиокумович Л. Б., Арчелков А. Б., Бучилко И. Р., Медведев А. В., Петров А. В.** Описание волоконных световодов с линейным двулучепреломлением при анализе практических оптоволоконных схем методом векторов и матриц Джонса // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 95–114.

21. **Ярив А., Юх П.** Оптические волны в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1987. 616 с.

22. **Джеррард А., Бёрч Дж. М.** Введение в матричную оптику. Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 344 с.

23. **Борн М., Вольф Э.** Основы оптики. Пер. с англ. М.: Наука, 1973. 720 с.

REFERENCES

1. **Liu Y., Song H.,** Theoretical analysis on polarization characteristics of spun birefringent optical fiber based on an analytical Jones matrix model, Optik. 228 (Febr) (2021) 166179.

2. **Barlow A. J., Ramskov-Hansen J. J., Payne D. N.,** Birefringence and polarization mode-dispersion in spun single-mode fibers, Appl. Opt. 20 (17) (1981) 2962–2968.

3. **Payne D. N., Barlow A. J., Ramskov-Hansen J. J.,** Development of low- and high-birefringence optical fibers, IEEE Trans. Microw. Theory Tech. 30 (4) (1982) 323–334.

4. **Polynkin P., Blake J.,** Polarization evolution in bent spun fiber, J. Light. Technol. 23 (11) (2005) 3815–3820.

5. **Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., et al.,** Active tapered double-clad fiber with low birefringence, Opt. Express. 29 (11) (2021) 16506–16519.

6. **Fedotov A., Ustimchik V., Rissanen J., et al.,** Large mode area double-clad ytterbium-doped spun tapered fiber, J. Opt. Soc. Am. B. 38 (12) (2021) F161–F169.

7. **Laming R. I., Payne D. N.,** Electric current sensors employing spun highly birefringent optical fibers, J. of Lightwave Technology. 7 (12) (1989) 2084–2094.

8. **Gubin V. P., Isaev V. A., Morshnev S. K., et al.,** Use of Spun optical fibres in current sensors, Quantum Electron. 36 (3) (2006) 287–291.

9. **Müller G. M., Frank A., Yang L., et al.,** Temperature compensation of interferometric and polarimetric fiber-optic current sensors with spun highly birefringent fiber, J. Light. Technol. 37 (18) (2019) 4507–4513.

10. **Przhiyalkovsky Ya. V., Gubin V. P., Starostin N. I., et al.,** Detection of electric current pulses by a fibre-optic sensor using spun fibre, Quantum Electron. 48 (1) (2018) 62–69.

11. **Temkina V., Medvedev A., Mayzel A.,** Research on the methods and algorithms improving the measurements precision and market competitive advantages of fiber optic current sensors, Sensors. 20 (21) (2020) 5995.

12. **Peng N., Huang Y., Wang S., et al.,** Fiber optic current sensor based on special spun highly birefringent fiber, IEEE Photon. Technol. Lett. 25 (17) (2013) 1668–1671.

13. **Wang Y., Xu C.-Q., Izraelian V.,** Characterization of spun fibers with millimeter spin periods, Opt. Express. 13 (10) (2005) 3841–3851.

14. **Hu H., Huang J., Huang Y, et al.,** Modeling of the birefringence in spun fiber, Opt. Commun. 473 (15 Oct) (2020) 125919.

15. **Yao P., Chen X., Hao P., et al.,** Introduction and measurement of the effective Verdet constant of spun optical fibers, Opt. Express. 29 (15) (2021) 23315–23330.

16. **Azzam R. M. A., Bashara N. M.,** Ellipsometry and polarized light, Third ed., North Holland Publishing Company, Amsterdam, Netherlands, 1999.

17. **Collett E.,** Polarized light in fiber optics, SPIE Press, Bellingham, Washington, USA, 2003.

18. **Ishchenko E. F., Sokolov A. L.,** Polyarizatsionnaya optika [Polarization optics], Third Ed., Fizmatlit Publishing, Moscow, 2019 (in Russian).

19. **Huard S.,** Polarization of light, John Wiley & Sons, Inc., Chichester, UK, 1997.

20. **Temkina V. S., Liokumovich L. B., Archelkov A. B., et al.,** Description of polarization-maintaining fibers in analyzing the practical fiber-optic circuits using the Jones formalism, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 95–114 (in Russian).

21. **Yariv A., Yeh P.,** Optical waves in crystals: propagation and control of laser radiation, John Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, Brislane, Toronto, Singapore, 1984.

22. **Gerrard A., Burch J. M.,** Introduction to matrix methods in optics, Dover Publications, Inc., New York, USA, 2012.

23. **Born M., Wolf E.,** Principles of optics, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТЕМКИНА Валентина Сергеевна – *ассистентка Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
temkina_vs@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2083-8989

ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429

АРЧЕЛКОВ Арсений Борисович – *студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
arsarch11@gmail.com
ORCID: 0009-0007-4713-1293

МЕДВЕДЕВ Андрей Викторович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
medvedev@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-7083-9184

КОЗЛОВ Артемий Сергеевич – *инженер Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kozlov_as@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1722-1964

ГРЕШНЕВИКОВ Константин Владимирович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kgreshnevikov@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-6154-2538

THE AUTHORS

TEMKINA Valentina S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
temkina_vs@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2083-8989

LIOKUMOVICH Leonid B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429

ARCHELKOV Arseniy B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
arsarch11@gmail.com
ORCID: 0009-0007-4713-1293

MEDVEDEV Andrei V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
medvedev@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-7083-9184

KOZLOV Artemy S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kozlov_as@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-1722-1964

GRESHNEVIKOV Konstantin V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kgreshnevikov@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-6154-2538

Статья поступила в редакцию 29.09.2023. Одобрена после рецензирования 09.11.2023. Принята 09.11.2023.

Received 29.09.2023. Approved after reviewing 09.11.2023. Accepted 09.11.2023.

St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 4
Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 16 (4) 2023

Mathematics

Original article
UDC 515.1.
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16417

FIXED POINT THEOREMS ON ORTHOGONAL METRIC SPACES VIA τ-DISTANCES

Y. Touail ✉ [1], **A. Jaid** [2], **D. El Moutawakil** [3]

[1] Sidi Mohamed Ben Abdellah University, Fès, Morocco

[2] Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal, Morocco

[3] Chouaib Doukkali University, El Jadida, Morocco

✉ youssef9touail@gmail.com

Abstract. In this paper, we prove two fixed point theorems in the setting of orthogonal complete metric spaces via τ-distances. Our theorems generalize and improve many known results in the literature (see, for example Refs. [6, theorem 4.2] and [3, theorem 3]).

Keywords: fixed point, orthogonal generalized E-weakly contractive maps, orthogonal metric space, Hausdorff topological spaces, τ-distance

For citation: Touail Y., Jaid A., El Moutawakil D., Fixed point theorems on orthogonal metric spaces via τ-distances, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 215–223. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16417

Научная статья
УДК 515.1.
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.16417

ТЕОРЕМЫ О НЕПОДВИЖНОЙ ТОЧКЕ НА ОРТОГОНАЛЬНЫХ МЕТРИЧЕСКИХ ПРОСТРАНСТВАХ, ДОКАЗАННЫЕ С ПОМОЩЬЮ ПОНЯТИЯ τ-РАССТОЯНИЯ

Ю. Туай ✉ [1], **А. Джайд** [2], **Д. Аль-Мутавакиль** [3]

[1] Университет Сиди Мохамеда Бен Абделлы, г. Фес, Марокко;

[2] Университет Султана Мулая Слимана, г. Бени-Меллал, Марокко;

[3] Университет Шуайб Дуккали, г. Эль-Джадида, Марокко

✉ youssef9touail@gmail.com

Аннотация. В этой статье мы доказываем две теоремы о неподвижной точке в задании ортогональных полных метрических пространств, используя понятие τ-расстояния. Выдвинутые и доказанные теоремы позволяют обобщить и улучшить многие известные результаты, опубликованные в литературе (см., например, результаты в статьях [6, теорема 4.2] и [3, теорема 3]).

Ключевые слова: неподвижная точка, ортогональное обобщенное E-слабосжимаемое отображение, ортогональное метрическое пространство, хаусдорфово топологическое пространство, τ-расстояние

Для цитирования: Туай Ю., Джайд А., Аль-Мутавакиль Д. Теоремы о неподвижной точке на ортогональных метрических пространствах, доказанные с помощью понятия τ-расстояния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 215–223. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.16417

Introduction

In 2003, M. Aamri and D. El Moutawakil [1] introduced the concept of τ-distance in general topological spaces. This innovation has extended a lot of ideas about known spaces presented in the literature. Moreover, these scientists proved a version of the Banach's fixed point theorem for this general setting.

In 2017, M. E. Gordji et al. [2] defined so-called orthogonal metric spaces as a generalization of the metric spaces. The authors showed in Ref. [2] that this type of spaces is very powerful and applicable to many cases, such as the fixed point theory. Then an important extension of Banach's fixed point theorem was given.

Without using the compactness of the space, the author of Ref. [6] put forward some fixed point theorems for new classes of mappings via τ-distance in general topological spaces (some related results can be found in Refs. [3 – 5, 7]).

In this paper, motivated by Refs. [2, 6], we extend some results proven in Ref. [6]; in other words, we will restrict our studies to the orthogonal elements only, in order to prove the fixed point property for a large class of contractive mappings. Our results will be based specially on some essential notions like orthogonality, τ-distances in the general topological spaces. Some important examples will also be given to support the proven theorems and to show the usability of this new direction of research.

Preliminaries

The aim of this section is to present some concepts and known results used in the paper.

Let (X, τ) be a topological space and $p: X \times X \to [0, +\infty)$ be a function. For any $\varepsilon > 0$ and any $x \in X$, let $B_p(x, \varepsilon) = \{y \in X / p(x, y) < \varepsilon\}$.

Definition I [1, definition 2.1]. The function p is said to be τ-distance if there exists $\varepsilon > 0$ for each $x \in X$ and any neighborhood V of x, such that $B_p(x, \varepsilon) \subset V$.

Definition II. In a Hausdorff topological space X, a sequence $\{x_n\}$ is said to be a p-Cauchy sequence if it satisfies the usual metric condition with respect to p; in other words, if $\lim_{n,m\to\infty} p(x_n, x_m) = 0$.

Definition III [1, definition 3.1]. Let (X, τ) be a topological space with a τ-distance p.

1. X is S-complete if there exists x in X for every p-Cauchy sequence (x_n), such that $\lim p(x, x_n) = 0$.
2. X is considered p-Cauchy complete if there exists x in X for every p-Cauchy sequence (x_n), such that $\lim x_n = x$ with respect to τ.
3. X is said to be p-bounded if $\sup\{p(x, y) / x, y \in X\} < \infty$.

Lemma 1 [1, lemma 3.1]. *Let (X, τ) be a Hausdorff topological space with a τ-distance p, then*

1) $p(x, y) = 0$ implies $x = y$.

2) Let (x_n) be a sequence in X such that lim $p(x, x_n) = 0$ and $\lim p(y, x_n) = 0$, *then $x = y$.*

Lemma 1 was proved in Ref. [1].

Definition IV. [1, definition 2.5]). Ψ is the class of all functions ψ from $[0, +\infty)$ to $[0, +\infty)$ satisfying:

i) ψ is nondecreasing,

ii) $\lim \psi^n(t) = 0$ for all $t \in [0, +\infty)$.

Definition V. Φ is the class of all functions ϕ from $[1, +\infty)$ to $[0, +\infty)$ satisfying:

i) $\phi(t) = 0$ if and only if $t = 1$,

ii) $\inf_{t>1} \phi(t) = 0$.

Theorem 1. [1, theorem 4.1]. *Let (X, τ) be a Hausdorff topological space with a τ-distance p. Suppose that X is p-bounded and S-complete. Let T be a selfmapping of X such that*

$$p(Tx, Ty) \le \phi(p(x, y)),$$

for all $x, y \in X$. Then T has a unique fixed point.

Theorem 1 was proved in Ref. [1].

Theorem 2 [6]. *Let* (X, τ) *be a Hausdorff topological space with a* τ*-distance* p*. Suppose that* X *is* p*-bounded and* S*-complete. Let* T *be a* p*-continuous selfmapping of* X *such that*

$$p\left(Tx,Ty\right)\leq\phi\left(\max\left\{p\left(x,y\right),p\left(x,Tx\right),p\left(y,Ty\right)\right\}\right), \tag{1}$$

f*or all* x, $y \in X$*. Then* T *has a unique fixed point.*

Theorem 2 was proved in Ref. [6].

Theorem 3 [6]. *Let* T*:* $X \to X$ *be a generalized E-weakly contractive mapping of a bounded complete metric space* (X, d)*. Then* T *has a unique fixed point.*

Theorem 3 was proved in Ref. [6].

Theorem 4 [6]. *Let* T*:* $X \to X$ *be a mapping of a bounded complete metric space* (X, d) *such that*

$$\inf_{x\neq y\in \mathrm{X}}\left\{\max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\}-d\left(Tx,Ty\right)\right\}>0. \tag{2}$$

Then T *has a unique fixed point.*

Theorem 4 was proved in Ref. [6].

Now we recall the definition of an orthogonal set and some related basic notions.

Definition VI [2]. *Let* $X\neq\phi$ and let $\perp\subset X\times X$ be a binary relation. If $\perp$ satisfies the following hypothesis:

$$\exists x_0:\left(\forall y,y\perp x_0\right)\mathrm{or}\left(\forall y,x_0\perp y\right), \tag{3}$$

then it called an orthogonal set (briefly *O*-set); we denote this *O*-set by (X, $\perp$).

Note that x_0 is said to be an orthogonal element in the Definition VI.

Remark. In general, x_0 is not unique, otherwise, (X, $\perp$) is called unique orthogonal set and the element x_0 is said to be a unique orthogonal element.

Definition VII [2]. Let(X, $\perp$) be an *O*-set. A sequence $\{x_n\}$ is called an orthogonal sequence (briefly, *O*-sequence) if

$$\left(\forall n,x_n\perp x_{n+1}\right)\mathrm{or}\left(\forall n,x_{n+1}\perp x_n\right).$$

Definition VIII [2]. The triplet (X, $\perp$, d) is called an orthogonal metric space if (X, d) is a metric space and (X, $\perp$) is the *O*-set.

Definition IX [2]. Let (X, $\perp$, d) be an orthogonal metric space. Then, a mapping T: $X \to X$ is said to be orthogonally continuous (briefly $\perp$-continuous) in $x \in X$, if for each *O*-sequence $\{x_n\} \subset X$ such that $x_n \to x$ as $n \to \infty$, we obtain $Tx_n \to Tx$ as $n \to \infty$. T is said to be $\perp$-continuous on X if T is $\perp$-continuous in each $x \in X$ as well.

Definition X [2]. Let (X, $\perp$, d) be an orthogonal metric space. Then, X is said to be orthogonally complete (or $\perp$-complete) if every Cauchy *O*-sequence is convergent.

Definition XI [2]. Let (X, $\perp$) be the *O*-set. A mapping T: $X \to X$ is said to be $\perp$-preserving if $Tx \perp Ty$ whenever $x \perp y$.

Remark [2]. Every complete metric space (continuous mapping) is *O*-complete metric space ($\perp$-continuous mapping) and the converse is not true.

Theorem 5 [2]. *Let* (X, $\perp$, d) *O-complete metric space and* T *a self-mapping on* X *which is* $\perp$*-preserving and* $\perp$*-continuous. If there exists* $k \in [0.1)$ *such that for all* x, $y \in X$

$$x \perp y \text{ implies } d(Tx, Ty) \leq kd\,(x, y).$$

Then T *has a unique fixed point.*

Theorem 5 was proved in Ref. [2].

Now, we give some examples of orthogonal spaces.

Example 1 [2]. Let $X = \mathbf{Z}$. Define the binary relation $\perp$ on X by $m \perp n$ if there exists $k \in \mathbf{Z}$ such that $m = kn$. It is easy to see that $0 \perp n$ for all $n \in \mathbf{Z}$. Hence, (X, $\perp$) is the *O*-set.

Example 2 [2]. Let X be an inner product space with the inner product. Define the binary relation $\perp$ on X by $x \perp y$ if $(x, y) = 0$. It is easy to see that $0 \perp x$ for all $x \in X$. Hence, (X, $\perp$) is the *O*-set.

For more details, we refer the reader to see Ref. [2].

Main results

In this section, we start with some definitions and lemmas.

Definition XII. The triplet $(X, \perp, d)$ is called an orthogonal Hausdorff topological space with a τ-distance p if (X, τ) is a Hausdorff topological space with a τ-distance p and $(X, \perp)$ is an orthogonal set.

Definition XIII. Let (X, τ) be a topological space with a τ-distance p. Then $T: X \to X$ is said to be orthogonal p-continuous at $x \in X$ if we have for any orthogonal $\{x_n\} \subset X$ such that $\lim p(x, x_n) = 0$.

Lemma 2. *Let $(X, \perp, d)$ be an orthogonal Hausdorff topological space with a τ-distance p such that $p(x, x) = 0$ for all $x \in X$. Suppose that X is p-bounded and S-complete. Let T be a ⊥-continuous and ⊥-preserving self-mapping of X such that $x \perp y$ implies*

$$p(Tx,Ty) \le \phi\Big(\max\big\{p(x,y), p(x,Tx)\, p(y,Ty)\big\}\Big), \tag{4}$$

for all $x, y \in X$, where $\phi \in \Phi$. Then has a unique fixed point.

Proof. Since X is an orthogonal set, there exists at least $x_0 \in X$ such that

$$\big(\forall y, y \perp x_0\big) \text{or} \big(\forall y, x_0 \perp y\big). \tag{5}$$

This implies that $x_0 \perp Tx_0$ or $Tx_0 \perp x_0$ Consider the iterated sequence $\{x_n\}$ such that $x_n = T^n x_0$ for all $n \in N$. As T is a ⊥-preserving, we obtain either $T^n x_0 \perp T^{n+1} x_0$ or $T^{n+1} x_0 \perp T^n x_0$ for all $n \in N$. Then $\{x_n\}$ is an O-sequence.

Let $n \in N$

$$p(x_{n+1}, x_{n+2}) \le \phi\Big(\max\big\{p(x_n, x_{n+1}), p(x_n, x_{n+1}), p(x_{n+1}, x_{n+2})\big\}\Big) \le$$
$$\le \phi\Big(\max\big\{p(x_n, x_{n+1}); p(x_{n+1}, x_{n+2})\big\}\Big).$$

If there exists $n \in N$ for which $p(x_{n_0}, x_{n_0+1}) < p(x_{n_0+1}, x_{n_0+2})$, then $p(x_{n_0+1}, x_{n_0+2}) < p(x_{n_0+1}, x_{n_0+2})$, this leads to contradiction.

Then $p(x_{n+1}, x_{n+2}) < p(x_n, x_{n+1})$ for all $n \in N$ which implies that

$$p(x_{n+1}, x_{n+2}) < \phi\big(p(x_n, x_{n+1})\big) \tag{6}$$

for every $n \in N$.

Now, let $n, m \in N$, we obtain from formula (5) $x_0 \perp x_n$ or $x_n \perp x_0$, using the fact that T is ⊥-preserving, we get $x_n \perp x_{n+m}$ or $x_{n+m} \perp x_n$, which implies by inequality (6) that

$$\begin{gathered}
p(x_n, x_{n+m}) = p(\mathrm{T}x_{n-1}, \mathrm{T}x_{n+m-1}) \le \\
\le \phi\Big(\max\big\{p(x_{n-1}, x_{n+m-1}), p(x_{n-1}, x_n), p(x_{n+m-1}, x_{n+m})\big\}\Big) \le \\
\le \phi\Big(\max\big\{p(x_{n-1}, x_{n+m-1}), p(x_{n-1}, x_n)\big\}\Big) \le \\
\le \phi\Big(\max\Big\{\phi\Big(\max\big\{p(x_{n-2}, x_{n+m-2}), p(x_{n-2}, x_{n-1})\big\}\Big), \phi\big(p(x_{n-2}, x_{n-1})\big)\Big\}\Big) \le \\
\le \phi^2\Big(\max\big\{p(x_{n-2}, x_{n+m-2}), p(x_{n-2}, x_{n-1})\big\}\Big) \le \\
\vdots \\
\le \phi^n\Big(\max\big\{p(x_0, x_m), p(x_0, x_1)\big\}\Big) \le \\
\le \phi^n(M),
\end{gathered} \tag{7}$$

where $M = \sup\{p(x, y) / x, y \in X\}$.

Letting $n \to \infty$ in formula (7), we deduce that $\{x_n\}$ is an orthogonal p-Cauchy sequence. Since X is an orthogonal S-complete space, there exists $u \in X$ such that $\lim p(u, x_n) = 0$.

On the other side, the orthogonal p-continuity of the mapping T implies that $\lim p(Tu, Tx_n) = \lim p(u, x_n) = 0$.

Therefore, Lemma 1 then gives $Tu = u$.

For uniqueness, let $v \in X$ a fixed point of T, hence we have either $x_0 \perp v$ or $v \perp x_0$. From the orthogonality preserving, we get $x_n \perp v$ or $v \perp x_n$, for all $n \in N$. So,

$$p\left(v,x_n\right) \leq \phi\Big(\max\left\{p\left(v,x_{n-1}\right),p\left(x_n,x_{n+1}\right)\right\}\Big);$$

then,

$$p\left(v,x_n\right) \leq \phi^n\left(\max\left\{p\left(v,x_0\right),p\left(x_0,x_1\right)\right\}\right). \tag{8}$$

Using Lemma 1 and letting $n \to \infty$ in the inequality (8), we obtain: $u = v$.

Note that the inequality $p(Tx, Ty) \leq \phi\ (p(x, y))$ implies that T is p-continuous.

Lemma 2 is proved.

Corollary. Let (X, τ) be a Hausdorff topological space with a τ-distance p. Suppose that X is p-bounded and S-complete. Let T be a p-continuous self-mapping of X such that

$$p\left(Tx,Ty\right) \leq \phi\Big(\max\left\{p\left(x,y\right),p\left(x,Tx\right),p\left(y,Ty\right)\right\}\Big) \tag{9}$$

for all $x, y \in X$, where $\phi \in \Phi$.

Then T has a unique fixed point.

Lemma 3. *Let* (X, d) *be a metric space and p from* $X \times X$ *to* $[0, +\infty)$ *be a function defined by*

$$p\left(x,y\right) = e^{d\left(x;y\right)} - 1. \tag{10}$$

Then p is a τ_d*-distance on X where* τ_d *is the metric topology.*

Proof. Let (X, τ_d) be the topological space with the metric topology τ_d, let $x \in X$ and V be an arbitrary neighborhood of x, then there exists $\varepsilon > 0$ such that $B_d(x, \varepsilon) \subset V$, where

$$B_d\left(x,\varepsilon\right) = \left\{y \in X, d\left(x,y\right) < \varepsilon\right\}$$

is the open ball. It is easy to see that $B_p(x, e^{\varepsilon} - 1) \subset B_d(x, \varepsilon)$, indeed:

let $y \in B_p(x, e^d - 1)$, then $p(x, y) < e^{\varepsilon} - 1$, which implies that $e^{d(x,y)} < e^{\varepsilon}$, and hence $d(x, y) < \varepsilon$.

Lemma 3 is proved.

Theorem 6. *Let* $(X, d, \perp)$ *be an orthogonal metric space and* T: $X \to X$ *be a mapping such that*

$$\inf_{x \perp y, x \neq y}\left\{\max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\} - d\left(Tx,Ty\right)\right\} > 0. \tag{11}$$

Then T has a unique fixed point.

Proof. Let $\alpha = inf_{x \perp y, x \neq y}\left\{\max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\} - d\left(Tx,Ty\right)\right\}$,

then for all $x \neq y \in X$, with $x \perp y$, we have

$$d\left(Tx,Ty\right) \leq \max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\} - \alpha,$$

hence

$$e^{d\left(Tx,Ty\right)} \leq ke^{\max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\}}, \tag{12}$$

where $k = e^{-\alpha} < 1$.

Moreover, $x \perp y$ implies

$$p\left(Tx,Ty\right) \leq k \max\left\{p\left(x,y\right),p\left(x,Tx\right),p\left(y,Ty\right)\right\}, \tag{13}$$

for all $x, y \in X$, where

$$p\left(x,y\right) = e^{d\left(x;y\right)} - 1$$

is the function mentioned in the formulation of Lemma 3, and by the inequality (13) T is an orthogonal p-continuous mapping. We also have $p(x, x) = 0$ for all $x \in X$.

Now, using Lemma 2 by taking $\phi\ (t) = kt$ for all $t \in [0, +\infty)$, we deduce from the inequality (13) that T has a unique fixed point.

Theorem 6 is proved.

Corollary [6]. Let T: $X \to X$ be a mapping of a bounded complete metric space (X, d) such that

$$\inf_{x\neq y}\left\{\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}-d(Tx,Ty)\right\}>0. \tag{14}$$

Then T has a unique fixed point.

Example 3. Let $X = \{-1, 0\} \cup [1, 2]$ be equipped with the usual metric $d(x, y) = |x - y|$. Suppose that $x \perp y$ if and only if $xy \in \{-1, 0\}$; it is easy to see that $(X, \perp)$ is an O-set. Let us define T: $X \to X$ by the following conditions:

$$Tx=\begin{cases} 0, \ \mathit{if}\ x\in\left\{-1,\ 0\right\}, \\ 2x, \ \mathit{if}\ x\in\left[1,\ \dfrac{3}{2}\right], \\ \dfrac{x}{2}, \ \mathit{if}\ x\in\left(\dfrac{3}{2},\ 2\right]. \end{cases}$$

Then T satisfies all conditions of Theorem 6 and 0 is the unique fixed point. Note that T does not satisfy all conditions (14) given by Corollary of Theorem 6; indeed,

$$\max\left\{d(0,\ 1),d(0,\ T0),d(1,\ T1)\right\}-d(T0,\ T1)=-1.$$

As applications of Theorem 6 we get a result for a new class of weakly contractive maps defined as follows.

Definition XIV. Let T: $X \to X$ be a mapping of a metric space (X, d), T will be said an orthogonal generalized E-weakly contractive map if $x \perp y$ implies

$$\begin{gathered} d(Tx,Ty)\le\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}- \\ -\phi\left(1+\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}\right), \end{gathered} \tag{15}$$

for all $x, y \in X$, where $\phi \in \Phi$ is a function for which the equality $\phi(1) = 0$ and inequality $\inf_{t>1} \phi(t) > 0$ hold.

Theorem 7. *Let T: $X \to X$ be an orthogonal generalized E-weakly contractive mapping of a bounded orthogonal complete metric space $(X, d, \perp)$. Then T has a unique fixed point.*

Proof. Let $x \neq y \in X$ and $x \perp y$, then from Definition XIV, we have

$$\begin{gathered} 0<\inf_{t>1}\phi(t)\le\phi\left(1+\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}\right)\le \\ \le\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}-d(Tx,Ty), \end{gathered}$$

and hence

$$\inf_{x\perp y,x\neq y}\left\{\max\left\{d(x,y),d(x,Tx),d(y,Ty)\right\}-d(Tx,Ty)\right\}>0.$$

According to Theorem 6, T has a unique fixed point in X.

Theorem 7 is proved.

Corollary [6]. Let T: $X \to X$ be an orthogonal generalized E-weakly contractive mapping of a bounded orthogonal complete metric space $(X, d, \perp)$. Then T has a unique fixed point.

Example 4. Let $X = \{0, 1, 2, 3\}$ endowed with the usual metric $d(x, y) = |x - y|$. Consider the mapping T: $X \to X$ defined as $T0 = 0 = T1$, $T2 = 3$ and $T3 = 2$.

Define a relation $\perp$ on X by

$x \perp y$ if and only if $xy \leq 1$.

Then $x \perp y$ implies

$$d\left(Tx,Ty\right)\leq \max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\}-$$
$$-\phi\left(1+\max\left\{d\left(x,y\right),d\left(x,Tx\right),d\left(y,Ty\right)\right\}\right),$$

where $\phi \in \Phi$ is a function defined by

$$\phi\left(t\right)=\begin{cases}0, & if\; t=1,\\ 1, & if\; t>1.\end{cases}$$

Therefore, all conditions of Theorem 7 are satisfied, and so T has the unique fixed point 0. On the other hand, since

$$d\left(T2,\ T3\right)=1>0=\max\left\{d\left(2,\ 3\right),d\left(2,\ T2\right),d\left(3,\ T3\right)\right\}-$$
$$-\phi\left(1+\max\left\{d\left(2,\ 3\right),d\left(2,\ T2\right),d\left(3,\ T3\right)\right\}\right),$$

the Corollary of Theorem 7 does not ensure the existence of the fixed point.

Summary and an open problem

We have established a fixed point for a new class of contractive mappings as an extension of some results (see Refs. [6, Theorem 4.2] and [3, Theorem 3]). This study was carried out only for orthogonal elements. In light of this, an open problem remains for interested researchers: whether we can generalize these results to “generalized orthogonal sets”. For more details on this topic see Refs. [8, 9].

REFERENCES

1. **Aamri M., El Moutawakil D.,** τ-distance in general topological spaces with application to fixed point theory, Southwest J. Pure Appl. Math. (2) (Dec) (2003) 1–5.
2. **Gordji M. E., Rameani M., De La Sen M., Cho Y. J.,** On orthogonal sets and Banach fixed point theorem, Fixed Point Theor. & Appl. 18 (2) (2017) 569–578.
3. **Touail Y., El Moutawakil D., Bennani S.,** Fixed point theorems for contractive self-mappings of a bounded metric space, J. Func. Spaces. 2019 (2019) 4175807.
4. **Touail Y., El Moutawakil D.,** Fixed point results for new type of multivalued mappings in bounded metric spaces with an application, Ric. di Mat. 71 (2) (2022) 315–323.
5. **Touail Y., El Moutawakil D.,** New common fixed point theorems for contractive self-mappings and an application to nonlinear differential equations, Int. J. Nonlinear Anal. Appl. 12 (1) (2021) 903–911.
6. **Touail Y., El Moutawakil D.,** Fixed point theorems for new contractions with application in dynamic programming, Vestnik St. Petersb. Univ. Math. 54 (2) (2021) 2006–2012.
7. **Touail Y., El Moutawakil D.,** Some new common fixed point theorems for contractive selfmappings with applications, Asian-Eur. J. Math. 15 (4) (2021) 2250080.
8. **Touail Y., El Moutawakil D.,** $\perp_{\psi F}$-contractions and some fixed point results on generalized orthogonal sets, Rend. Circ. Mat. Palermo, Ser. 2. 70 (3) (2021) 1459–1472.
9. **Touail Y.,** On multivalued $\perp_{\psi F}$-contractions on generalized orthogonal sets with an application to integral inclusions, Probl. Anal. Issues Anal. 11 (29) (3) (2022) 109–124.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Aamri M., El Moutawakil D.** τ-distance in general topological spaces with application to fixed point theory // Southwest Journal of Pure and Applied Mathematics. 2003. No. 2. December. Pp. 1–5.
2. **Gordji M. E., Rameani M., De La Sen M., Cho Y. J.** On orthogonal sets and Banach fixed point theorem // Fixed Point Theory and Applications. 2017. Vol. 18. No. 2. Pp. 569–578.
3. **Touail Y., El Moutawakil D., Bennani S.** Fixed point theorems for contractive selfmappings of a bounded metric space // Journal of Function Spaces. 2019. Vol. 2019. Article ID 4175807. https://doi.org/10.1155/2019/4175807.

4. **Touail Y., El Moutawakil D.** Fixed point results for new type of multivalued mappings in bounded metric spaces with an application // Ricerche di Matematica. A Journal of Pure and Applied Mathematics. 2022. Vol. 71. No. 2. Pp. 315–323.

5. **Touail Y., El Moutawakil D.** New common fixed-point theorems for contractive self-mappings and an application to nonlinear differential equations // International Journal of Nonlinear Analysis and Applications. 2021. Vol. 12. No. 1. Pp. 903–911.

6. **Туаль Ю., Аль-Мутавакиль Д.** Теоремы о неподвижной точке для новых сжимающих отображений с приложением в динамическом программировании // Вестник СПБГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2021. Т. 8 (66). № 2. С. 338–348.

7. **Touail Y., El Moutawakil D.** Some new common fixed point theorems for contractive selfmappings with applications // Asian-European Journal of Mathematics. 2021. Vol. 15. No. 4. P. 2250080.

8. **Touail Y., El Moutawakil D.** $\perp_{\psi F}$-contractions and some fixed point results on generalized orthogonal sets // The Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo. 2021. Series 2. Vol. 70. No. 3. Pp. 1459–1472.

9. **Touail Y.** On multivalued $\perp_{\psi F}$-contractions on generalized orthogonal sets with an application to integral inclusions // Проблемы анализа – Issues of Analysis. 2022. Т. 11 (29). № 3. С. 109–124.

THE AUTHORS

TOUAIL Youssef
Sidi Mohamed Ben Abdellah University, Fès, Morocco
Faculté des Sciences Dhar El Mahraz
Route Imouzzer BP 2626, Fès, 30000, Morocco
youssef9touail@gmail.com
ORCID: 0000-0003-3593-8253

JAID Amine
Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal, Morocco
Av. Med. V, BP 591, Beni-Mellal, 23000, Morocco
aminejaid1990@gmail.com

EL MOUTAWAKIL Driss
Chouaib Doukkali University, El Jadida, Morocco
6GG6+P89, Av. des Facultés, El Jadida, 24000, Morocco
d.elmoutawakil@gmail.com

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТУАЙ Юсеф – *аспирант факультета науки и технологий Университета Сиди Мохамеда Бен Абделлы, г. Фес, Марокко.*
Route Imouzzer BP 2626, Fès, 30000, Morocco
youssef9touail@gmail.com
ORCID: 0000-0003-3593-8253

ДЖАЙД Амин – *аспирант Университета Султана Мулая Слимана, г. Бени-Меллал, Марокко.*
Av. Med. V, BP 591, Beni-Mellal, 23000, Morocco
aminejaid1990@gmail.com

АЛЬ-МУТАВАКИЛЬ Дрисс – *PhD, профессор Университета Шуайб Дуккали, г. Эль-Джадида, Марокко*
6GG6+P89, Av. des Facultés, El Jadida, 24000, Morocco
d.elmoutawakil@gmail.com

Received 15.11.2022. Approved after reviewing 26.09.2023. Accepted 26.09.2023.

Статья поступила в редакцию 15.11.2022. Одобрена после рецензирования 26.09.2023. Принята 26.09.2023.

Научное издание

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

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS»

ТОМ 16, № 4, 2023

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных
технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Телефон редакции 8 (812) 552-62-16

Сайт https://physmath.spbstu.ru/

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

Подписано в печать 30.12.2023. Формат 60х84/8. Печать цифровая.
Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного ИЦ "ИКИ",
в Издательско-полиграфическом центре
Санкт-Петербургского политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
Физико-математические науки»

1.ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 1.1.8., 1.1.9., 1.3.2., 1.3.3., 1.3.4., 1.3.5., 1.3.6., 1.3.7., 1.3.8., 1.3.11., 1.3.19.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word.**

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без знаков переноса. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончится **ДОСРОЧНО**.

E-mail: physics@spbstu.ru,
Сайт журнала: https://physmath.spbstu.ru/