МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 19, №3, 2026

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2026

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., 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.

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 8 (812) 552-62-16.

http://ntv.spbstu.ru/physics

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY

JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 19, No.3, 2026

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2026

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
VA.I. Rudskoy – 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. Karaseov – 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 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: 8 (812) 552-62-16.
http://ntv.spbstu.ru/physics

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2026

Содержание

Физика конденсированного состояния

Филимонов А. В., Бондаренко В. Б. *Влияние самокомпенсации полупроводника на неоднородности эффективного барьера Шоттки в контактах на основе III-нитридов* 9

Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В. *Получение и свойства нанопористой сегнетоэлектрической керамики* $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ 18

Хвиюзов С. С., Волков А. С. *Анализ температурно-частотных зависимостей удельной электропроводности ванилиновой кислоты* 27

Математическое моделирование физических процессов

Башкатов С. О., Сергеев В. Ю., Капралов В. Г. *Моделирование сценариев работы системы смягчения последствий срыва разряда в токамаке ТРТ* 35

Филиппов В. В., Ершов А. А. *Анализ точности аналитических методов расчета электрических полей постоянного тока в ограниченной области* 52

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Герчиков Л. Г., Шейнерман С. А. *Расчет спектров фотоэлектронной эмиссии, возникающей при фотоионизации атомных 1s-оболочек, сопровождающейся последующими радиационным и Оже распадами внутренних вакансий (статья на английском языке)* 63

Приборы и техника физического эксперимента

Гольдберг Е. В., Апушкинский Е. Г., Кожевников В. А., Круковская Л. П., Тихонова Т. А. *Установка для исследования эффекта Доплера* 73

Физическая электроника

Нгуен В. Т. А., Архипов А. В., Дао Т. Л. З., Нгуен Х. З., Нгуен Х. И., Лыонг В. Д., Нгуен М. Т., Архипов Н. А., Сунь Х., Лукша О. И., Габдуллин П. Г. *Свойства и применение полугейслеровых сплавов в тонкопленочных термоэлектрических генераторах для низких и средних температур* 82

Физическое материаловедение

Балыш З. С., Володина Д. В., Грудинкин С. А., Еуров Д. А., Курдюков Д. А., Глебова Н. В., Стовпяга Е. Ю. *Характеристики пористости частиц кремнезема со сверхвысокой удельной поверхностью на этапах формирования (статья на английском языке)* 116

Ядерная физика

Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов Ю. Г. *Возможности измерять свойства* $K^*(892)^0$*-резонанса и* $\varphi(1020)$*-резонанса в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5A ГэВ в эксперименте MPD* 125

Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Трушков Д. А. *Определение центральности ион-ионных столкновений в условиях малых значений множественности* 139

Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Неумин Д. В. *Анализ особенностей рождения идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона и вольфрама при энергии 2,5A ГэВ с помощью модели blast-wave*..... 150

Круашвили Д. В., Бердников Я. А. *Двойная продольная спиновая асимметрия легких псевдоскалярных мезонов, рожденных в столкновениях продольно-поляризованных протонов* 162

Радиофизика

Маркварт А. А., Завалишина Л. Д., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. *Моделирование чирпированной волоконной брэгговской решетки в маломодовом ступенчатом световоде при осесимметричном возбуждении* 171

Механика

Эсанов Н. К. *Нелинейные колебания твердого тела, установленного на вязкоупругих колеблющихся опорах* 183

Contents

Condensed matter physics

Filimonov A. V., Bondarenko V. B. *Effect of semiconductor self-compensation on the inhomogeneities of the effective Schottky barrier in III-nitride-based contacts* 9

Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V. *Preparation and properties of nanoporous ferroelectric ceramics* $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ 18

Khviyuzov S. S., Volkov A. S. *An analysis of temperature-frequency dependences of specific conductivity of vanillic acid* 27

Simulation of physical processes

Bashkatov S. O., Sergeev V. Yu., Kapralov V. G. *Simulation of operational scenarios for a system mitigating the consequences of a discharge disruption in the TRT tokamak* 35

Filippov V. V., Ershov A. A. *An analysis of the accuracy of analytical methods for calculating the DC electric fields in a limited area* 52

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Gerchikov L. G., Sheinerman S. A. *Calculations of photoelectron emission spectra resulting from atomic 1s shell photoionization followed by sequential radiative and Auger decays of inner vacancies* 63

Experimental technique and devices

Goldberg E. V., Apushkinskiy E. G., Kozhevnikov V. A., Krukovskaya L. P., Tikhonova T. A. *A setup for investigating the Doppler effect* 73

Physical electronics

Nguyen V. T. A., Arkhipov A. V., Dao T. L. D., Nguyen H. D., Nguyen H. Y., Luong V. D., Nguyen M. T., Arkhipov N. A., Sun H., Louksha O. I., Gabdullin P. G. *Properties and applications of the half-Heusler alloys in thin-film thermoelectric generators for low and medium temperatures* ... 82

Physical materials technology

Balysh Z. S., Volodina D. V., Grudinkin S. A., Eurov D. A., Kurdyukov D. A., Glebova N. V., Stovpiaga E. Yu. *Porosity characteristics of ultra-high specific surface area silica particles at formation stages* 116

Nuclear physics

Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V., Riabov Yu. G. *The possibilities of measuring the properties of* $K^*(892)^0$ *and* $\varphi(1020)$ *resonances in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV in the MPD experiment* 125

Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Trushkov D. A. *Determination of the centrality of ion-ion collisions under low-multiplicity conditions* 139

Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Neumin D. V. *An analysis of identified charged hadron production in Xe+W collisions at 2.5A GeV using the blast-wave model* 150

Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A. *The double longitudinal spin asymmetry of light pseudoscalar mesons produced in collisions of longitudinally polarized protons* 162

Radiophysics

Markvart A. A., Zavalishina L. D., Liokumovich L. B., Ushakov N. A. *Simulation of a chirped fiber Bragg grating in a few-mode step-index optical fiber under axisymmetric excitation* 171

Mechanics

Esanov N. K. *Nonlinear vibrations of a solid body installed on viscous-elastic vibrating supports* ... 183

Физика конденсированного состояния

Научная статья
УДК 538.915
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19301

ВЛИЯНИЕ САМОКОМПЕНСАЦИИ ПОЛУПРОВОДНИКА НА НЕОДНОРОДНОСТИ ЭФФЕКТИВНОГО БАРЬЕРА ШОТТКИ В КОНТАКТАХ НА ОСНОВЕ III-НИТРИДОВ

А. В. Филимонов ✉, **В. Б. Бондаренко**
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ afilimonov@spbstu.ru

Аннотация. В работе исследуются контактные структуры с барьером Шоттки на основе III-нитридов. С использованием представления о дискретном распределении заряда электроактивных дефектов в области обеднения полупроводника анализируются неоднородности высоты барьера Шоттки с учетом сил зеркального изображения. Определены характерные величины и масштабы изменения эффективного барьера в контакте, обусловленные флуктуациями электрических полей заряженных атомов примеси и прорастающих дислокаций несоответствия. Показано, что при сильной компенсации полупроводника, вследствие захвата носителей на дислокационные состояния (эффект самокомпенсации), средние значения неоднородности высоты эффективного барьера Шоттки достигают величины порядка 100 мэВ. Продемонстрирована возможность минимизации исследуемых неоднородностей путем выбора уровня легирования полупроводника.

Ключевые слова: эффективный барьер Шоттки, самокомпенсация III-нитридов, естественный размерный эффект, неоднородности барьера Шоттки

Для цитирования: Филимонов А. В., Бондаренко В. Б. Влияние самокомпенсации полупроводника на неоднородности эффективного барьера Шоттки в контактах на основе III-нитридов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 9–17. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19301

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19301

EFFECT OF SEMICONDUCTOR SELF-COMPENSATION ON THE INHOMOGENEITIES OF THE EFFECTIVE SCHOTTKY BARRIER IN III-NITRIDE-BASED CONTACTS

A. V. Filimonov ✉, **V. B. Bondarenko**
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russia
✉ afilimonov@spbstu.ru

Abstract. This paper examines Schottky barrier contact structures based on III-nitrides. Using the concept of discrete charge distribution of electroactive defects in the semiconductor depletion region, inhomogeneities in the Schottky barrier height have been analyzed, taking into account the mirror image forces. Characteristic quantities and scales of effective barrier changes in the contact were determined, caused by fluctuations in the electric fields of charged impurity atoms and threading misfit dislocations. The average inhomogeneities in the effective

© Филимонов А. В., Бондаренко В. Б., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Schottky barrier height were shown to reach values of approximately 100 meV while strong semiconductor compensation due to carrier trapping at dislocation states (i.e., the self-compensation effect) took place. The possibility of minimizing these inhomogeneities by selecting the semiconductor doping level was demonstrated.

Keywords: effective Schottky barrier, self-compensation of III-nitrides, natural size effect, Schottky barrier inhomogeneities

For citation: Filimonov A. V., Bondarenko V. B., Effect of semiconductor self-compensation on the inhomogeneities of the effective Schottky barrier in III-nitride-based contacts, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 9–17. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19301

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

Введение

Выпрямляющий контакт металл-полупроводник (контакт Шоттки) является практически необходимой составной частью импульсных, высокочастотных и сверхвысокочастотных электронных схем. Свойства такого контакта используются в поверхностно-барьерных структурах для обработки сигналов при вертикальном переносе заряда (в диодах Шоттки) и для управления латеральным током (например, в полевых транзисторах с затвором Шоттки). В настоящее время особое внимание уделяется исследованию соответствующих контактных структур в силовых приборах на основе карбида кремния [1] и нитридов элементов III группы [2 – 7].

В указанных материалах, в силу технологических особенностей синтеза, содержится значительное количество протяженных линейных дефектов – прорастающих дислокаций несоответствия, обладающих плотностью порядка 10^9 см$^{-2}$ и более [8]. Заполнение дислокационных электронных состояний приводит к формированию локально-неоднородного электрического поля у поверхности и в контактных структурах [9]. Это обстоятельство, очевидно, приводит к изменениям высоты барьера Шоттки в контакте металл-полупроводник ввиду действия сил зеркального изображения, определяя соответствующий избыточный ток через контакт.

Известно, что вследствие перераспределения электронной плотности на поверхности металла высота эффективного барьера зависит от величины приконтактной напряженности электрического поля F [10]:

$$U_{eff}\left(F\right) \approx U_0 - \sqrt{\frac{e^3 F}{\varepsilon}}, \tag{1}$$

где U_0 – величина изгиба зон полупроводника, ε – его диэлектрическая проницаемость.

В ряде случаев указанное понижение барьера в контактах металл-полупроводник может быть значительным (т.е. превышать характерную тепловую энергию kT) вследствие локальных флуктуаций полей дискретных зарядов легирующей примеси у межфазной границы. Ранее было показано [11], что в области пространственного заряда примесных полупроводников имеет место естественный размерный эффект, вследствие которого в слоях обеднения контактных структур, на масштабах длин экранирования, не происходит статистического усреднения данных электрических полей в широком диапазоне уровней легирования. Однако, как показывают оценки, в обычных контактах металл-полупроводник существенное изменение высоты эффективного барьера возможно при наличии высоких степеней легирования (порядка 10^{19} см$^{-3}$) [12] или при формировании равновесного диффузионно-дрейфового распределения электроактивных дефектов [13].

Дополнительного исследования заслуживают частично-компенсированные системы, в которых возможна самоорганизация заряженной примеси [14]. Некоторым аналогом частичной самоорганизации является появление заряженных дислокаций [8, 15].

Цель настоящей работы – определение возможных неоднородностей барьера Шоттки, вызванных флуктуациями полей электроактивных дефектов (дислокаций и атомов примеси), в структурах на основе III-нитридов, с учетом сил зеркального изображения.

© Filimonov A. V., Bondarenko V. B., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В дальнейшем рассматривается выпрямляющий контакт металл – алюмо-галлиевый нитрид (AlGaN) в состоянии теплового равновесия.

Модель полностью обедненного слоя

Профиль изгиба зон в полупроводнике можно рассчитать путем решения одномерного уравнения Пуассона. Поскольку для выпрямляющего контакта в большинстве случаев с хорошей точностью выполняется условие $U_0 >> kT$, вполне применима модель полностью обедненного слоя. В рамках данного приближения объемный заряд в области изгиба зон представляется локализованным зарядом легирующей примеси (для определенности – донорной) с концентрацией N_0 и электронным зарядом, захваченным на дислокационных состояниях. С учетом такой своеобразной частичной самокомпенсации полупроводника для планарной структуры контакта имеем следующее уравнение:

$$\frac{d^2U}{dx^2} = \frac{4\pi e^2 N_0}{\varepsilon}\cdot\left(1-K\right), \tag{2}$$

где x – декартова координата, перпендикулярная плоскости контакта; K – уровень самокомпенсации полупроводника.

Величина K должна зависеть от концентрации дислокаций N_{disl} и заряда, накопленного на их электронных состояниях и характеризуемого линейной плотностью λ.

В простейшем случае равномерного распределения компенсирующего заряда величина K следует выражению:

$$K = \frac{\lambda N_{disl}}{eN_0}. \tag{3}$$

Поскольку в правой части уравнения (2) теперь находится, с учетом выражения (3), величина, не зависящая от координаты, в качестве решения, удовлетворяющего стандартным граничным условиям, для профиля изгиба зон получаем следующую степенную функцию:

$$U\left(x\right) = U_0\left(\frac{L_0 - x}{L_0}\right)^2. \tag{4}$$

Параметр L_0, имеющий размерность длины в выражении (4) и определяющий ширину области пространственного заряда, выражается следующим образом:

$$L_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon U_0}{2\pi e^2 N_0\left(1-K\right)}}. \tag{5}$$

Полученное распределение поля в контакте (4), очевидно, является математическим ожиданием случайной величины, конкретные значения которой зависят от степени локализации точечных и линейных дефектов в обедненной области полупроводника. В дальнейшем для проведения статистического анализа будем использовать ранее примененный алгоритм [9, 11], в рамках которого предполагается некоррелированное распределение электроактивных дефектов в полупроводнике.

Неоднородности барьера Шоттки: случай собственного полупроводника

Прежде всего рассмотрим частный случай нелегированного полупроводника в контакте с металлом, когда объемный заряд формируется только заряженными дислокациями. В этом случае ширина области обеднения зависит от произведения двух величин: концентрации дислокаций и заселенности дислокационных состояний:

$$L_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon U_0}{2\pi e\lambda N_{disl}}}. \tag{6}$$

При наличии пуассоновского ансамбля заряженных дислокаций характерная величина флуктуаций напряженности электрического поля имеет вид [9]:

$$\delta F = \frac{4\lambda\sqrt{\pi N_{disl}}}{\varepsilon}. \tag{7}$$

Представленная выше функция (1) случайного аргумента F удовлетворяет методу переноса ошибок [16]. Этот метод позволяет определять с приемлемой точностью величину δU_{eff} – характерных флуктуаций высоты эффективного барьера Шоттки:

$$\delta U_{eff} \approx \left| \left. \frac{\partial U_{eff}}{\partial F} \right|_{F_0} \right| \cdot \delta F, \tag{8}$$

где F_0 – средняя величина напряженности электрического поля на межфазной границе в контакте, которая выражается как $F_0 = 4\pi e N_s/\varepsilon$; при этом величина N_s определяет поверхностную концентрацию заряда в данной системе и следует выражению $N_s = \lambda N_{disl} L_0/e$.

Вычисление значения производной функции $U_{eff}(F)$ при $F = F_0$ с учетом выражения (7) и подстановка результата в выражение (8) приводит к следующему результату:

$$\delta U_{eff} = \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{\frac{e^3\lambda}{L_0}}. \tag{9}$$

Расчет по формуле (9) показывает, что для типичных величин параметров рассматриваемой структуры ($\varepsilon \approx 10$ [17], $U_0 \approx 0{,}3$ эВ, $N_{disl} \approx 10^{10}$ см$^{-2}$) и близких к максимально возможной плотности заряда $\lambda \approx 0{,}01$ ед. СГСЭ, значения флуктуации высоты эффективного барьера Шоттки в среднем оказываются соизмеримыми по порядку величины с характерной тепловой энергией kT при комнатной температуре.

Неоднородности барьера Шоттки: случай легированного полупроводника

Более общий случай предполагает наличие легирующей примеси (доноров) с частичной самокомпенсацией полупроводника за счет заполнения дислокационных состояний. При этом выражение для поверхностной концентрации заряда в контакте имеет следующий вид:

$$N_s = N_0 L_0 - \frac{\lambda N_{disl} L_0}{e} = N_0 L_0 \left(1 - K\right). \tag{10}$$

В этой формуле ширина области пространственного заряда L_0 определяется выражением (5). Соответствующее среднее значение напряженности приконтактного поля оказывается пропорциональным $\sqrt{1-K}$.

Вклад пуассоновского ансамбля ионизованных доноров в неоднородность этого поля характеризуется величиной δF_{ion}, которая выражается следующим образом [11]:

$$\delta F_{ion} = \frac{4e}{\varepsilon}\sqrt{\frac{\pi N_0}{L_0}}. \tag{11}$$

С учетом статистической независимости подсистем зарядов собственных и примесных дефектов (дислокаций и доноров) и их вкладов в флуктуацию полей (см. выражения (7) и (11)), для среднеквадратичного отклонения величины напряженности поля в контакте имеем:

$$\delta F = \frac{4}{\varepsilon}\sqrt{\pi\left(\frac{e^2 N_0}{L_0} + \lambda^2 N_{disl}\right)}. \tag{12}$$

Применив снова метод переноса ошибок (см. формулу (8)), получаем окончательное выражение для величины δU_{eff}:

$$\delta U_{eff} = \frac{1}{\varepsilon}\sqrt{\frac{e^3}{L_0\left(1-K\right)}\left(\frac{e}{L_0} + \lambda K\right)}. \tag{13}$$

Типичные зависимости δU_{eff} от уровня легирования полупроводника для трех значений плотности заряженных дислокаций приведены на рис. 1.

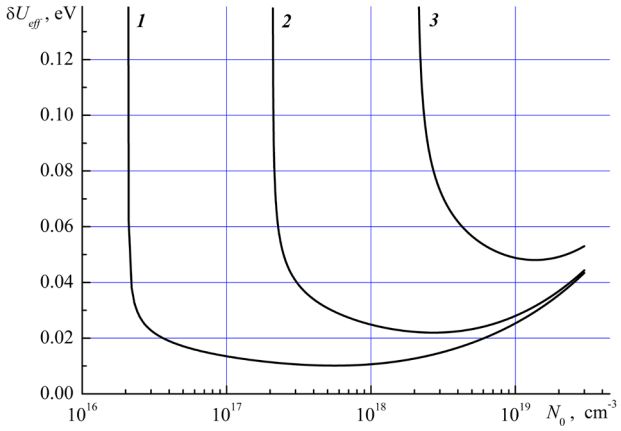


Рис. 1. Зависимости средних значений неоднородности высоты эффективного барьера Шоттки от уровня легирования структур AlGaN для трех значений плотности их дислокаций N_{disl}, см$^{-2}$: 10^9 (*1*), 10^{10} (*2*) и 10^{11} (*3*).
Линейная плотность заряда дислокаций $\lambda = 0{,}01$ ед. СГСЭ, величина изгиба зон $U_0 = 0{,}3$ эВ

Анализ и обсуждение полученных результатов

Прежде всего следует отметить, что на зависимостях, представленных на рис. 1, имеются области резкого роста величины δU_{eff} по мере приближения к значениям уровня самокомпенсации полупроводника, близким к единице. Непосредственно из выражения (13) следует, что при $K \to 1$ значения δU_{eff} пропорциональны $(1 - K)^{-1/4}$ и формально обращаются в бесконечность. Ограничение величин неоднородностей произойдет вследствие конечности значений приконтактного изгиба зон полупроводника и эффектов экранирования, аналогичных таковым, имеющих место в сильно компенсированных полупроводниках [18]. В рамках представленной здесь модели реально достигаемые значения δU_{eff} могут иметь порядок 100 мэВ, что многократно превышает типичные величины флуктуаций высоты барьера Шоттки $e^2/\varepsilon L_0$ в отсутствие самокомпенсации полупроводника (т.е. при $K = 0$). Характерный масштаб неоднородностей, определенных таким образом, сопоставим с радиусом ридовского цилиндра [8]:

$$R = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi e N_0}} = \sqrt{\frac{K}{\pi N_{disl}}}. \qquad (14)$$

Из выражения (14) очевидно, что при высоких уровнях самокомпенсации полупроводника (т.е. при $K \approx 1$) соответствующий масштаб сравним с величиной среднего расстояния между дислокациями. Следовательно, указанные неоднородности барьера Шоттки уже не являются мелкомасштабными. Кроме того, стоит отметить немонотонность зависимости

$$\delta U_{eff} = \delta U_{eff}(N_0).$$

Физическая причина такого поведения функции δU_{eff} – в конкуренции эффекта увеличения мощности протяженных источников поля и подавляющего действия естественного размерного эффекта при сильной самокомпенсации полупроводника. Из графиков на рис. 1 следует, что существует оптимальная величина концентрации легирующей примеси N_0^{opt}, которой соответствует минимум неоднородностей эффективного барьера Шоттки. Исходя из зависимости (13), результат получается в явном виде:

$$N_0^{opt} = \frac{\lambda N_{disl}}{e} + \left(\frac{\lambda^2 N_{disl}}{2e^3} \sqrt{\frac{\varepsilon U_0}{2\pi}} \right)^{2/3}. \qquad (15)$$

С точки зрения технологии наибольший интерес может представлять зависимость N_0^{opt} от плотности заряженных дислокаций. Соответствующие графики для двух значений

заселенности дислокационных состояний приведены на рис. 2. Однако последующий анализ выражения (15) показал, что при относительно небольших значениях плотности дислокаций, не превышающих 10^{10} см$^{-2}$, значения оптимальных уровней легирования в основном определяются вторым слагаемым. Поэтому в большинстве случаев величина N_0^{opt} практически пропорциональна $N_{disl}^{2/3}$.

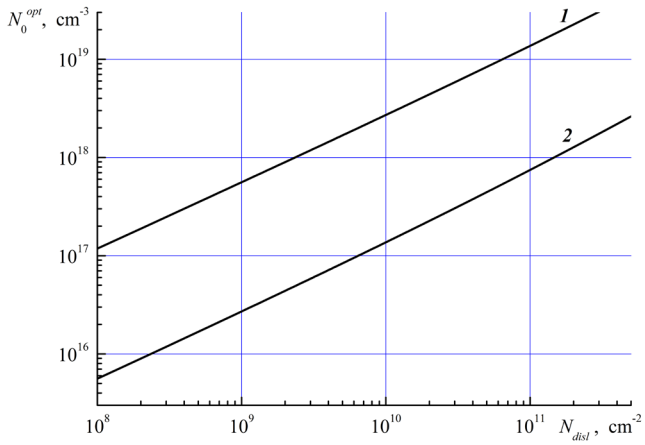


Рис. 2. Зависимости величины оптимальной концентрации доноров в структуре AlGaN от плотности в ней дислокаций при двух значениях линейной плотности их заряда λ, ед. СГСЭ: 0,010 (*1*) и 0,001 (*2*). Величина изгиба зон U_0 = 0,3 эВ

Полученные результаты, в рамках представленной модели, согласуются с опытными данными, представленными в ряде работ (см., например, статьи [19, 20]). В обзорной статье [19], посвященной контактам Шоттки на основе AlGaN, отмечается, что неоднородности высоты барьера, обусловленные дислокациями и точечными дефектами, действительно могут достигать значений порядка 100 мэВ. В статье [20] о влиянии легирования на механизмы токопереноса показано, что изменение уровня легирования может приводить к немонотонному изменению высоты барьера в контакте Шоттки.

Заключение

В настоящей работе проведен в рамках единой аналитической модели систематический анализ влияния флуктуаций электрического поля, обусловленных случайным распределением заряженных дислокаций и ионизованных доноров, на неоднородности эффективного барьера Шоттки в контактах на основе III-нитридов. Показано, что в условиях сильной самокомпенсации полупроводника, возникающей вследствие захвата носителей на дислокационные состояния, средние значения флуктуаций высоты эффективного барьера Шоттки могут достигать значений порядка 100 мэВ, что уже сопоставимо с величинами изгиба зон и, следовательно, способно оказывать определяющее влияние на токоперенос в реальных приборах.

Ключевым результатом работы следует считать установление немонотонной зависимости величины неоднородностей от уровня легирования. Показано существование оптимальной концентрации донорной примеси, при которой флуктуации барьера минимальны. Данный результат имеет прямое практическое значение, поскольку указывает технологический путь повышения однородности и воспроизводимости параметров диодов Шоттки и транзисторов с затвором Шоттки на основе нитрида галлия и его твердых растворов.

Несмотря на сделанные упрощения (отсутствие учета корреляции в расположении дефектов и влияния границы раздела), предложенная модель закладывает основу для интерпретации ряда экспериментальных данных по исследованию контактов металл-полупроводник и может быть распространена на более сложные случаи, включая неравновесные условия и температурные зависимости.

Полученные результаты рекомендуется использовать при проектировании силовых и высокочастотных приборов на основе III-нитридов с целью минимизации разброса характеристик и повышения надежности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kimoto T., Cooper J. A.** Fundamentals of silicon carbide technology: growth, characterization, devices, and applications. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley-IEEE Press, 2014. 555 p.

2. **Kalinina E. V., Kuznetsov N. I., Dmitriev V. A., Irvine K. G., Carter C. H.** Schottky barriers on *n*-GaN grown on SiC // Journal of Electronic Materials. 1996. Vol. 25. May. Pp. 831–834.

3. **Shiojima K., Woodall J. M., Eiting C. J., Grudowski P. A., Dupuis R. D.** Effect of defect density on the electrical characteristics of *n*-type GaN Schottky contacts // Journal of Vacuum Science & Technology B. 1999. Vol. 17. No. 5. Pp. 2030–2033.

4. **Tracy K. M., Hartlieb P. J., Einfeldt S., Davis R. F., Hurt E. H., Nemanich R. J.** Electrical and chemical characterization of the Schottky barrier formed between clean *n*-GaN(0001) surfaces and Pt, Au, and Ag // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 94. No. 6. Pp. 3939–3948.

5. **Torkhov N. A., Babak L. I., Kokolov A. A., Salnikov A. S., Dobush I. M., Novikov V. A., Ivonin I. V.** Nature of size effects in compact models of field effect transistors // Journal of Applied Physics. 2016. Vol. 119. No. 9. P. 094505.

6. **Тихомиров В. Г., Чижиков С. В., Гудков А. Г., Устинов В. М.** Влияние поверхностных ловушек на статические характеристики и разброс тока насыщения канала GaN HEMT-транзисторов // Письма в Журнал технической физики. 2023. Т. 49. № 22. С. 43–46.

7. **Царик К. А., Чуканова О. Б., Козловская Е. А.** Особенности конструкции гетероструктур при построении GaN нормально-закрытых транзисторов для силовых монолитных интегральных схем // Наноиндустрия. 2023. Т. 16. № 1. С. 70–79.

8. **Красавин С. Е.** О влиянии заряженных дислокационных стенок на подвижность в эпитаксиальных слоях GaN // Физика и техника полупроводников. 2012. Т. 46. № 5. С. 616–619.

9. **Бондаренко В. Б., Филимонов А. В., Kumar R.** Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 1. С. 12–14.

10. **Родерик Э. Х.** Контакты металл-полупроводник. Пер. с англ. М.: Радио и связь, 1982. 208 с.

11. **Бондаренко В. Б., Кузьмин М. В., Кораблев В. В.** Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. № 8. С. 964–968.

12. **Bondarenko V. B., Davydov S. N., Nacke B., Filimonov A. V.** Chaotic potential on the degenerated semiconductor surface // Key Engineering Materials. 2019. Vol. 806. July. Pp. 17–23.

13. **Бондаренко В. Б., Филимонов А. В., Королева Е. Ю.** Барьер Шоттки при равновесном распределении примеси в полупроводнике // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 10. С. 79–81.

14. **Бондаренко В. Б., Филимонов А. В.** Хаотический потенциал на поверхности компенсированного полупроводника в условиях самоорганизации электрически активных дефектов // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 9. С. 1223–1226.

15. **Шикин В. Б., Шикина Ю. В.** Заряженные дислокации в полупроводниковых кристаллах // Успехи физических наук. 1995. Т. 165. № 8. С. 887–917.

16. **Худсон Д.** Статистика для физиков: Лекции по теории вероятностей и элементарной статистике. Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 298 с.

17. **Jena D., Wood C.** Polarization effects in semiconductors: From *ab initio* theory to device applications. New York: Springer, 2008. 515 p.

18. **Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.** Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979. 416 с.

19. **Besendörfer S., Meissner E., Medjdoub F., Derluyn J., Friedrich J., Erlbacher T.** The impact of dislocations on AlGaN/GaN Schottky diodes and on gate failure of high electron mobility transistors // Scientific Reports. 2020. Vol. 10. 14 October. P. 17252.

20. **Pu T., Tang S.-F., Kuang-Po H., Chiu H.-C., Liu X.** AlGaN/GaN Schottky barrier diodes on free-standing GaN substrates with a Si doped barrier layer // IEEE Journal of the Electron Devices Society. 2022. Vol. 10. 7 April. Pp. 318–323.

REFERENCES

1. **Kimoto T., Cooper J. A.,** Fundamentals of silicon carbide technology: growth, characterization, devices, and applications, Wiley-IEEE Press, Hoboken, New Jersey, USA, 2014.

2. **Kalinina E. V., Kuznetsov N. I., Dmitriev V. A., et al.,** Schottky barriers on *n*-GaN grown on SiC, J. Electron. Mater. 25 (May) (1996) 831–834.

3. **Shiojima K., Woodall J. M., Eiting C. J., et al.,** Effect of defect density on the electrical characteristics of *n*-type GaN Schottky contacts, J. Vac. Sci. Technol. B. 17 (5) (1999) 2030–2033.

4. **Tracy K. M., Hartlieb P. J., Einfeldt S., et al.,** Electrical and chemical characterization of the Schottky barrier formed between clean *n*-GaN(0001) surfaces and Pt, Au, and Ag, J. Appl. Phys. 94 (6) (2003) 3939–3948.

5. **Torkhov N. A., Babak L. I., Kokolov A. A., et al.,** Nature of size effects in compact models of field effect transistors, J. Appl. Phys. 119 (9) (2016) 094505.

6. **Tikhomirov V. G., Chizhikov S. V., Gudkov A. G., Ustinov V. M.,** The effect of surface traps on the static characteristics and the saturation current spread in the channel of GaN HEMTs, Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki. 49 (22) (2023) 43 –46 (in Russian).

7. **Tsarik K. A., Chukanova O. B., Kozlovskaya E. A.,** Design features of heterostructures for construction of GaN normally-off transistors for power monolithic integrated circuits, Nanoindustry. 16 (1) (2023) 70–79.

8. **Krasavin S. E.,** Effect of charged dislocation walls on mobility in GaN epitaxial layers, Semiconductors. 46 (5) (2012) 616–619.

9. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V., Kumar R.,** A chaotic potential of charged dislocations in group III-nitride heterojunctions, Tech. Phys. Lett. 47 (1) (2021) 8–10.

10. **Rhoderick E. H., Williams R. H.,** Metal-semiconductor contacts (Monographs in Electrical and Electronic Engineering, Vol. 19), Clarendon Press, Oxford Science Publications, 1988.

11. **Bondarenko V. B., Korablev V. V., Kuzmin M. V.,** Analysis of inherent potential nonuniformities at the intrinsic-semiconductor surface, Semiconductors. 35 (8) (2001) 927–931.

12. **Bondarenko V. B., Davydov S. N., Nacke B., Filimonov A. V.,** Chaotic potential on the degenerated semiconductor surface, Key Eng. Mater. 806 (Jul) (2019) 17–23.

13. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V., Koroleva E. Y.,** The Shottky barrier at homogeneous impurity distribution in a semiconductor, J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 4 (5) (2010) 859–861.

14. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V.,** On a chaotic potential at the surface of a compensated semiconductor under conditions of the self-assembly of electrically active defects, Semiconductors. 49 (9) (2015) 1187–1190.

15. **Shikin V. B., Shikina Yu. V.,** Charged dislocations in semiconductor crystals, Phys. Usp. 38 (8) (1995) 845–875.

16. **Hudson D. J., Statistics.** Lectures on elementary statistics and probability, CERN Yellow Reports: Monographs, Geneva, Switzerland, 1964.

17. **Jena D., Wood C.,** Polarization effects in semiconductors: From *ab initio* theory to device applications, Springer, New York, 2008.

18. **Shklovskii B. I., Efros A. L.,** Electronic properties of doped semiconductors, Springer Science & Business Media, Berlin, Heidelberg, Germany, 2013.

19. **Besendörfer S., Meissner E., Medjdoub F., et al.,** The impact of dislocations on AlGaN/GaN Schottky diodes and on gate failure of high electron mobility transistors, Sci. Rep. 10 (14 Oct) (2020) 17252.

20. **Pu T., Tang S.-F., Kuang-Po H., et al.,** AlGaN/GaN Schottky barrier diodes on free-standing GaN substrates with a Si doped barrier layer, IEEE J. Electron Devices Soc. 10 (7 Apr) (2022) 318–323.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, 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
afilimonov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

БОНДАРЕНКО Вячеслав Борисович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vyacheslav.b.bondarenko@mail.ru
ORCID: 0000-0002-9357-3902

THE AUTHORS

FILIMONOV Alexey V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
afilimonov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

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

Статья поступила в редакцию 04.03.2026. Одобрена после рецензирования 21.04.2026. Принята 21.04.2026.
Received 04.03.2026. Approved after reviewing 21.04.2026. Accepted 21.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 537.226
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19302

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА НАНОПОРИСТОЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$

С. В. Барышников [1], А. Ю. Милинский [1], Е. В. Стукова [2] ✉

[1] Благовещенский государственный педагогический университет, г. Благовещенск, Россия;

[2] Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия

✉ lenast@bk.ru

Аннотация. Изготовлены образцы пористой сегнетоэлектрической керамики на основе цирконата свинца с добавлением наночастиц титаната бария (10 мол.%) и исследованы их свойства; при этом проведено сравнительное исследование с плотной керамикой того же состава. Образование пор достигалось при спекании керамики сжиганием углеродных трубок, добавленных в шихту (2 масс. %). Поверхности образцов изучали методом сканирующей электронной микроскопии. Для точного определения их фазового состава и структурных параметров использовали метод порошковой рентгеновской дифракции. Были измерены и проанализированы температурные зависимости диэлектрической проницаемости объектов. Для контроля эффективной спонтанной поляризации образцов измеряли пироэлектрический ток. Установлено, что для синтезированной керамики характерна ромбоэдрическая полярная фаза. Малые размеры частиц титаната бария обеспечивают ускорение диффузионных процессов и способствуют образованию термодинамически равновесных однофазных твердых растворов. Пористая керамика, полученная с добавлением углеродных нанотрубок, обладает пористостью 20 – 25% и высокоэффективной спонтанной поляризацией. Такой материал можно применять в качестве адсорбентов различных веществ с полярными молекулами и катализаторами.

Ключевые слова: цирконат свинца, титанат бария, спонтанная поляризация, диэлектрическая проницаемость, фазовый переход

Для цитирования: Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В. Получение и свойства нанопористой сегнетоэлектрической керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 18–26. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19302

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19302

PREPARATION AND PROPERTIES OF NANOPOROUS FERROELECTRIC CERAMICS $(Pb_{0.9}Ba_{0.1})(Zr_{0.9}Ti_{0.1})O_3$

S. V. Baryshnikov [1], A. Yu. Milinskiy [1], E. V. Stukova [2] ✉

[1] Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russia;

[2] Amur State University, Blagoveshchensk, Russia

✉ lenast@bk.ru

Abstract. The results of the study of the properties of porous ferroelectric ceramics based on lead zirconate with the addition of 10 mol.% barium titanate with an average particle size of 50 nm have been presented in comparison with dense ceramics of the same composition. To obtain the porous ceramics, multiwalled carbon nanotubes were added to the batch in an amount of 2 wt.%. During the sintering process the tubes burned forming pores. Using a

© Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

number of physical methods, it was found that the synthesis of ceramics based on lead zirconate with the addition of barium titanate nanoparticles leads to the formation of a rhombohedral polar phase. The small particle size of barium titanate accelerates diffusion processes and promotes the formation of thermodynamically equilibrium single-phase solid solutions. The porous ceramics exhibit highly effective spontaneous polarization.

Keywords: lead zirconate, barium titanate, spontaneous polarization, permittivity, phase transition, ferroelectric phase

For citation: Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V., Preparation and properties of nanoporous ferroelectric ceramics $(Pb_{0.9}Ba_{0.1})(Zr_{0.9}Ti_{0.1})O_3$, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 18–26. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19302

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

Введение

Сегнетоэлектрические керамики со структурой перовскита представляют собой важный класс функциональных материалов, широко применяемых в датчиках, преобразователях энергии, исполнительных устройствах и системах микроэлектромеханики [1]. Среди наиболее распространенных представителей данного класса соединений стоит выделить цирконат свинца $PbZrO_3$ [2, 3] и цирконат-титанат свинца $Pb(Zr,Ti)O_3$ [4]. Кроме того, в последние годы значительное внимание уделяется разработке новых композиционных сегнетоэлектрических материалов на основе перовскитных оксидов, направленной на улучшение функциональных характеристик и расширение областей их применения [5].

Антисегнетоэлектрические свойства цирконата свинца обнаружены в 1950-х гг. [6, 7]. Под влиянием разных внешних факторов этот материал способен менять свою структуру, что привлекательно как для фундаментальных исследований, так и для практических применений. При температуре свыше 230°C цирконат свинца находится в кубической фазе (постоянная решетки $a \approx 4{,}15$ Å). В области около 230°C имеет место фазовое превращение, которое сопровождается появлением аномалии диэлектрических свойств. Ниже этой температуры цирконат свинца переходит в орторомбическую модификацию ($a = 5{,}888$ Å, $b = 11{,}758$ Å и $c = 8{,}222$ Å) [7]. Проведенные ранее исследования [8, 9] указывают на возможность появления в цирконате свинца сегнетоэлектрической фазы и ее стабилизации в небольшом температурном интервале от 10 до 25°C в процессе охлаждения ниже 230°C. Известно, что сегнетоэлектрическая фаза стабилизируется при введении примесей, а также в твердых растворах типа $Pb(Zr,Ti)O_3$. Результаты исследований свойств керамики $(PbZrO_3)_{1-x}(BaTiO_3)_x$, представленные в работах [10, 11], показывают, что в зависимости от значения x (x – молярная доля вещества) и температуры спекания, в этих соединениях может формироваться ромбоэдрическая или тетрагональная сегнетоэлектрическая фаза. В нашей статье [12] было показано, что для составов $(PbZrO_3)_{1-x}(BaTiO_3)_x$ максимальное значение диэлектрической постоянной наблюдается при $x = 0{,}1$.

Одним из перспективных направлений исследований является создание пористых сегнетоэлектрических керамик, поскольку наличие контролируемой пористой структуры позволяет существенно модифицировать их электрофизические и механические свойства. В ряде недавних работ было показано, что контролируемая пористость позволяет оптимизировать пьезоэлектрические и диэлектрические параметры перовскитных керамик для применения в акустических преобразователях, сенсорах давления и системах преобразования энергии [13]. Кроме того, изменение морфологии и распределения пор оказывает существенное влияние на процессы поляризации и доменную структуру сегнетоэлектрических материалов [14].

Для формирования пористой структуры в сегнетоэлектрических керамиках используются различные методы, включая введение выгорающих органических добавок, использование порообразующих частиц и применение шаблонных структур [15]. В последние годы

© Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Yu., Stukova E. V., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

все большее внимание привлекает использование наноуглеродных материалов, в частности углеродных нанотрубок, в качестве функциональных добавок и порообразующих компонентов. Многостенные углеродные нанотрубки (УНТ) обладают высокой механической прочностью, обширной удельной поверхностью и высокой электропроводностью, что делает их перспективными модификаторами керамических матриц. В процессе высокотемпературной обработки УНТ обычно выгорают, образуя поры и одновременно влияя на процессы роста зерен и формирование межзеренных границ [16]. Недавние исследования показали, что введение многостенных УНТ может приводить к возникновению регулируемой пористой структуры и в сегнетоэлектрических керамиках, а также существенно влиять на их диэлектрические и пьезоэлектрические свойства [16].

Несмотря на значительный прогресс в области исследования сегнетоэлектрических керамик, вопросы создания пористых структур в системах на основе цирконата свинца, модифицированных титанатом бария и наноуглеродными добавками, остаются малоизученными. В частности, недостаточно исследовано влияние УНТ на процессы спекания, формирование микроструктуры и распределение пор в подобных системах, а также на их сегнетоэлектрические свойства.

Цели настоящей работы – получить пористую и плотную керамики одинакового состава и провести сравнение их сегнетоэлектрических свойств.

В качестве объекта исследования была выбрана керамика на основе цирконата свинца с добавлением титаната бария ввиду того, что твердые растворы $PbZrO_3$ изучены очень подробно, представляя, по сути, классический фундамент современной функциональной электрокерамики.

Образцы и методика эксперимента

Изготовление образцов. *На первом этапе* изготовления образцов, для получения плотной керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ в вибрационной мельнице ММ 500 Control, на частоте колебаний 30 Гц в течение 60 мин, происходило мокрое механическое измельчение оксида свинца PbO (химически чистый). Средний размер измельченных частиц составлял 500 нм. В процессе спекания керамики происходит частичный уход свинца, поэтому оксид свинца добавляли с избытком: 5 мол.%. В качестве цирконийсодержащего компонента использовали диоксид циркония ZrO_2 (чистота 99,9 %) с размером частиц около 20 нм. Для получения композитного материала в систему вводили 10 мол.% титаната бария $BaTiO_3$ (чистота 99,9 %) со средним размером частиц 50 нм.

Полученную смесь дополнительно перемешивали в вибрационной мельнице в течение 1 ч с целью обеспечения однородности. Формование осуществлялось методом холодного прессования под давлением $8 \cdot 10^3$ кг/см^2. В результате были получены дискообразные образцы диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм.

Процесс синтеза соединения $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ и спекания керамики проводили за один цикл при температуре 1150°C с выдержкой 2 ч при максимальной температуре. Плотность синтезированной керамики достигала 7,64 г/см^3, что соответствовало 97,4% от расчетной теоретической плотности.

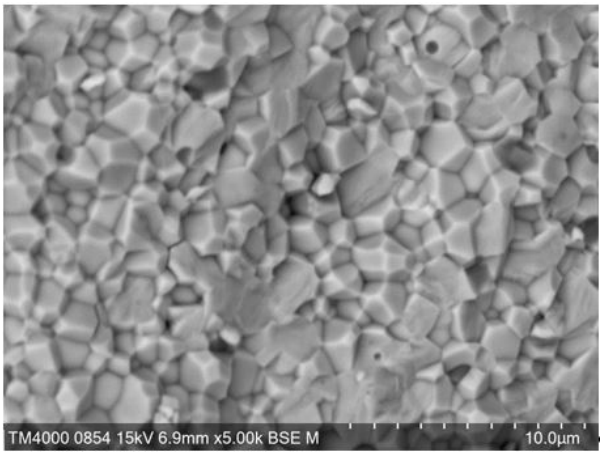


Рис. 1. СЭМ-изображение скола плотной керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$

На рис. 1 представлено изображение скола образца $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$, полученное методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ).

На втором этапе изготовления образцов, для получения пористой керамики перед смешиванием компонентов в шихту добавляли многостенные углеродные нанотрубки в процентной доле 2 масс.%. Использовались УНТ (чистота 98%), изготовленные компанией Beijing Kaifa Special Material Manufacture Co LTD (Китай) методом

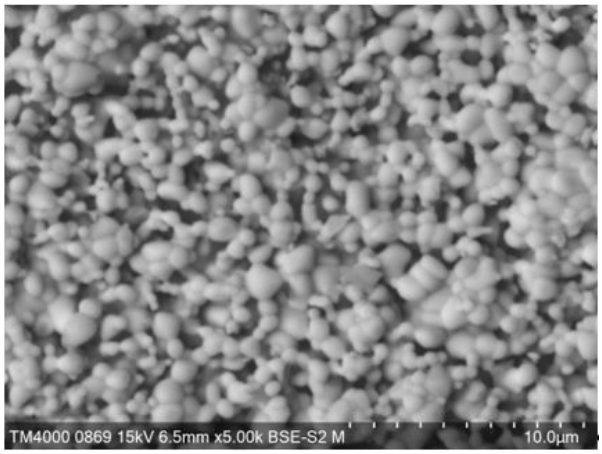


Рис. 2. СЭМ-изображение поверхности пористой керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$

химического осаждения из газовой фазы. Число слоев, согласно данным производителя, составляло 15 – 25, внешний диаметр лежал в интервале 8 – 15 нм, внутренний – 3 – 5 нм. Размер агломератов УНТ составлял 300 – 700 нм. Далее полученную смесь прессовали и спекали при температуре 1100°С. При спекании керамики углеродные трубки выгорали, в результате чего в ней образовывались поры. Кроме того, выгорание углеродных трубок приводило к дополнительному выделению энергии (393 кДж/моль) и локальному нагреву вещества. Стоит отметить, что благодаря локальному нагреву пористую керамику можно спекать при меньших значениях температуры, по сравнению с плотным аналогом.

Как показали наши исследования, для керамики с добавлением 2 масс.% УНТ средний размер пор составлял 250 нм, а общая пористость 20 – 25%. На рис. 2 представлена микрофотография поверхности образца пористой керамики.

Описание измерений. Рентгеновские исследования методом порошковой рентгеновской дифракции (*англ.* X-Ray Powder Diffraction (XRPD)) были выполнены на порошковом дифрактометре Tongda TD-3700 (Китай) с использованием рентгеновского излучения CuK_α ($\lambda \approx 1{,}5406$ Å) с никелевым фильтром в стандартной геометрии Брэгг – Брентано при температуре 25°С. Измерения проводились в диапазоне углов 2θ от 20 до 90°, который достаточен для определения кристаллической структуры соединений типа $PbZrO_3 + n\%\ BaTiO_3$ и выявления возможных примесных фаз в этих системах. Параметры съемки, которые имели значения экспозиции (1,5 – 2,0) с на каждой точке и пошаговое сканирование через 0,02° по 2θ, обеспечивали достаточное количество точек для точного определения фазового состава и определения структурных параметров.

Кристаллическую структуру и параметры решетки *a* и *c* образцов определяли из анализа полученных дифрактограмм с использованием полнопрофильного анализа методом Ритвельда.

Диэлектрические характеристики исследовали с помощью импеданс-метра Е7-25 с частотным диапазоном 25 Гц – 1 МГц. Температуру контролировали прибором Термодат-13К5 с хромель-алюмелевой термопарой (точность составляла около 0,1°С). Исследования проводили при циклическом нагреве и охлаждении образца в температурном интервале (20 – 300)°С с регистрацией данных через каждые 0,2°С.

Значения спонтанной поляризации полученной керамики рассчитывались путем интегрирования пироэлектрического тока по времени [17, 18]. В эксперименте пироэлектрический ток измерялся в условиях короткого замыкания, которое поддерживалось с помощью операционного усилителя [17].

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Как показали рентгеновские исследования (рис. 3), образцы плотной и пористой керамик $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ состояли из однофазного твердого раствора ромбоэдрической сингонии *R*3*c*.

Параметры кристаллической решетки $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ составили:

$a = 5{,}856$ Å, $c = 14{,}428$ Å (плотная керамика);

$a = 5{,}843$ Å, $c = 14{,}392$ Å (пористая керамика).

Инструментальная погрешность составляла 0,002 Å. Анализ данных показал, что переход от плотной керамики к пористой не приводит к существенным структурным искажениям. Образцы сохраняли однофазную ромбоэдрическую структуру, а параметры решетки изменялись лишь незначительно (в пределах третьего знака после запятой). Такой результат свидетельствует о стабильности кристаллической структуры твердого раствора, которая практически не зависит от плотности образца.

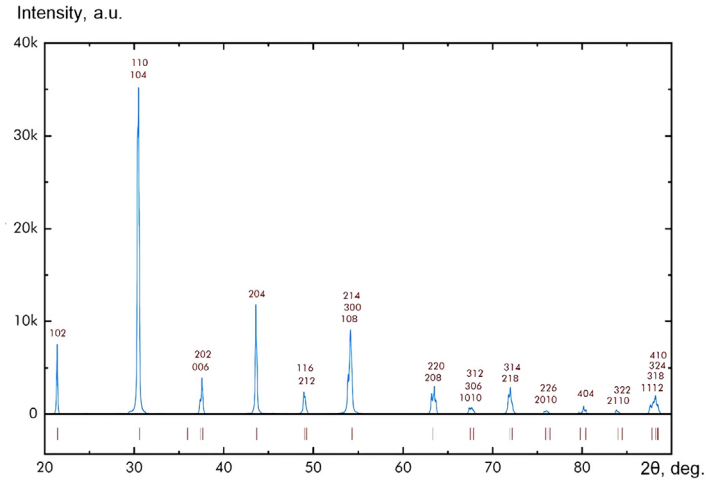


Рис. 3. Дифракционная картина образца плотной керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ (индексы *hkl* представлены числами над пиками)

Диэлектрические исследования проводились в частотном диапазоне 1 кГц – 1 МГц и температурном интервале 20 – 300°C. На рис. 4 представлены температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε′ образцов $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ на разных частотах. Из графика ε′(*T*) на рис. 4, *a* следует, что во всем исследуемом температурном диапазоне наблюдается один фазовый переход с температурой Кюри T_C = 226°C. При повышении частоты измерения происходит снижение диэлектрической проницаемости. Если на частоте 1 кГц ε′ имеет максимальное значение около 20 тыс., то на частоте 1 МГц это значение уменьшается примерно до 16 тыс., при этом значения тангенса угла диэлектрических потерь tgδ в точке фазового перехода меняются от 0,06 до 0,09. Спонтанная поляризация, определенная из пироэлектрического эффекта, при комнатной температуре составляет 50 – 55 мкКл/см^2, что сравнимо с другими свинецсодержащими сегнетоэлектриками типа титаната и цирконата-титаната свинца.

Исследования диэлектрических свойств образцов пористой керамики повторялись при тех же условиях, что и для плотной. На рис. 4, *b* приведены аналогичные температурные зависимости диэлектрической проницаемости для пористой керамики на разных частотах. Из графика следует, что фазовый переход наблюдается при температуре 228°C, что всего

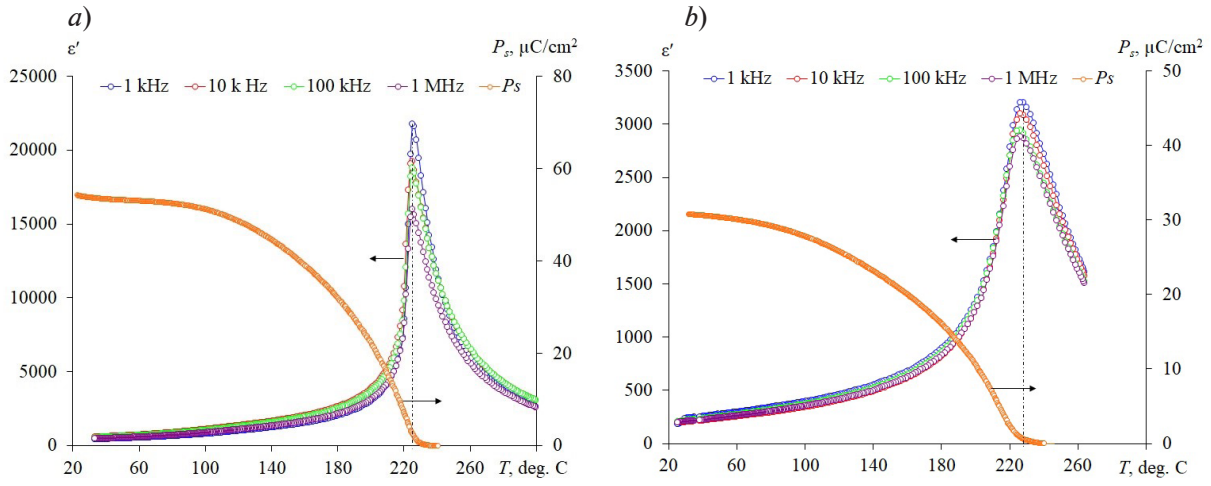


Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости и спонтанной поляризации для образцов плотной (*a*) и пористой (*b*) керамик $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$. Вертикальные пунктирные прямые указывают значения температуры Кюри T_C = 226°C (*a*) и T_C = 228°C (*b*)

на два градуса выше, чем для керамики без УНТ. С повышением частоты наблюдается некоторое снижение величины диэлектрической проницаемости; на частоте 1 кГц она достигает максимального значения около 3200, тогда как на частоте 1 МГц это значение снижается примерно до 2800; при этом значения tgδ в точке фазового перехода слегка повышаются от 0,040 до 0,045.

Сравнение приведенных результатов показывает, что у пористой керамики диэлектрическая проницаемость уменьшается примерно в 5 раз относительно плотной. Однако эффективная спонтанная поляризация снижается всего в два раза и составляет 25 – 30 мкКл/см^2.

Появление частотной дисперсии диэлектрической проницаемости в сегнетоэлектрической керамике связано с наличием нескольких механизмов поляризации, которые различаются значениями времени релаксации [19 – 21]. В частотном диапазоне 1 – 10 кГц эта дисперсия обусловлена движением доменных стенок и межзеренной поляризацией Максвелла – Вагнера; в диапазоне 10 – 100 кГц – релаксацией дипольных дефектов; в диапазоне 100 – 1000 кГц основной вклад вносит ориентационная релаксация дефектов. Значение $\varepsilon' \approx 15\,000$ в области фазового перехода при 1 МГц для плотной керамики соответствует ионной поляризации решетки, «очищенной» от медленных механизмов. Для пористой же керамики уменьшение эффективной диэлектрической проницаемости обусловлено воздушными прослойками.

Образование сегнетоэлектрической фазы в твердом растворе $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ можно объяснить разницей ионных радиусов Ba^{2+} (1,61 Å) и Pb^{2+} (1,49 Å) в *A*-позиции перовскита. Это различие создает внутреннее химическое давление, которое деформирует кристаллическую решетку и способствует смещению ионов относительно центра симметрии, что служит необходимым условием для возникновения сегнетоэлектрической поляризации. Использование нанопорошков для синтеза керамики $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$ позволяет ускорить процесс образования твердого раствора и получение более совершенной структуры керамики.

Заключение

В результате проведенного исследования было установлено, что наличие в смеси наночастиц титаната бария при синтезе керамики на основе цирконата свинца приводит к образованию твердого раствора ромбоэдрической фазы. Уменьшение размера наночастиц $BaTiO_3$ обеспечивает ускорение диффузионных процессов и способствует образованию термодинамически равновесных однофазных твердых растворов. Пористая керамика на основе соединения $(Pb_{0,9}Ba_{0,1})(Zr_{0,9}Ti_{0,1})O_3$, полученная с добавлением углеродных нанотрубок, имеет пористость 20 – 25% и высокое значение эффективной спонтанной поляризации, что позволяет ее использовать в качестве полярных наноразмерных матриц для исследования размерных эффектов в веществе в присутствии электрических полей [22]. Кроме этого, такие пористые полярные матрицы можно применять в качества адсорбентов для различных веществ с полярными молекулами и катализаторами [23].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Xiao M., Xu A., Sui Z., Zhang W., Liu H., Lee C.** Multifunctional MEMS, NEMS, micro/nano-structures enabled by piezoelectric and ferroelectric effects // Nanoscale Horizons. 2025. Vol. 10. No. 11. Pp. 2744–2771.

2. **Liu Z., Guo Z., Wan H., Yuan Y., Yang H., Wu H., Ren W., Ye Z. G.** High energy storage capacity, heterogeneous domain structure and stabilization of intermediate phase in $PbZrO_3$-based antiferroelectric single crystals // Journal of Materials Chemistry C. 2022. Vol. 10. No. 17. Pp. 6762–6769.

3. **Liu B., Gaur A. P. S., Cui J., Tan X.** Substitution of Pb with $(Li_{1/2}Bi_{1/2})$ in $PbZrO_3$-based antiferroelectric ceramics // Journal of Advanced Dielectrics. 2024. Vol. 14. No. 1. P. 2350022.

4. **Zhao T., Li J., Yang X., Yin Z.** A review of the preparation and application of lead zirconate titanate (PZT) thin film sensors // Journal of Materials Chemistry C. 2025. Vol. 13. No. 31. Pp. 15807–15851.

5. **Wang W., Chen Z., Zhou Z., Li Y., Liang R.** Enhancing electromechanical properties of PZT-based piezoelectric ceramics by high-temperature poling for high-power applications // ACS Applied Materials & Interfaces. 2023. Vol. 15. No. 12. Pp. 15636–15645.

6. **Sawaguchi E., Maniwa H., Hoshino S.** Antiferroelectric structure of lead zirconate // Physical Review. 1951. Vol. 83. No. 5. P. 1078.

7. **Jona F., Shirane G., Mazzi F., Pepinsky R.** X-ray and neutron diffraction study of antiferroelectric lead zirconate, $PbZrO_3$ // Physical Review. 1957. Vol. 105. No. 3. Pp. 849–856.

8. **Tennery V. J.** High-temperature phase transitions in $PbZrO_3$ // Journal of the American Ceramic Society. 1966. Vol. 49. No. 9. Pp. 483–486.

9. **Scott B. A., Burn G.** Crystal growth and observation of the ferroelectric phase of $PbZrO_3$ // Journal of the American Ceramic Society. 1972. Vol. 55. No. 7. Pp. 331–333.

10. **Khushbu N., Kumar P.** Effect of sintering temperature on structural, dielectric and ferroelectric properties of $BaTiO_3$-$PbZrO_3$ ceramics // Ferroelectrics. 2017. Vol. 516. No. 1. Pp. 167–172.

11. **Cai W., Fu C., Gao J., Chen H.** Effects of grain size on domain structure and ferroelectric properties of barium zirconate titanate ceramics // Journal of Alloys and Compounds. 2009. Vol. 480. No. 2. Pp. 870–873.

12. **Барышников С. В., Милинский А. Ю., Стукова Е. В.** Стабилизация сегнетоэлектрической фазы в керамике $PbZrO_3$ при добавлении наночастиц $BaTiO_3$ // Стекло и керамика. 2025. Т. 98. № 10. С. 24–30.

13. **Bakhtiar S. U. H., Hussain S. A., Ali S., et al.** Innovative perspectives on porous ferroelectric ceramics and their composites: charting new frontiers in energy applications // Materials Today Communications. 2024. Vol. 38. March. P. 108388.

14. **Guerra J. D. S., Peláiz-Barranco A., Silva A. C., Calderyn-Picar F.** Figures of merit of PLZT ferroelectric ceramics for practical applications // Ferroelectrics. 2023. Vol. 611. No. 1. Pp. 138–149.

15. **Zhou X., Gong H., Zhang J., Liu J., Zhang D., Zhang Y.** Pore structure-dependent pyroelectric properties of porous PZT ceramics fabricated by template method // Journal of Materials Chemistry A. 2025. Vol. 13. No. 47. Pp. 40689–40697.

16. **Wang Q., He Sh., Bowen C. R., Xiao X., Oh J. A. S., Sun J., Zeng K., Lei W., Chen J.** Porous pyroelectric ceramic with carbon nanotubes for high-performance thermal to electrical energy conversion // Nano Energy. 2022. Vol. 102. November. P. 107703.

17. **Glass A. M.** Investigation of the electrical properties of $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$ with special reference to pyroelectric detection // Journal of Applied Physics. 1969. Vol. 40. No. 12. Pp. 4699–4713.

18. **Сотникова Г. Ю., Зеленовский П. С., Ушаков А. Д., Гаврилов Г. А., Шур В. Ю., Холкин А. Л.** Исследование пироэлектрического эффекта в легированных неполярных кристаллах глицина // Журнал технической физики. 2023. Т. 98. № 5. С. 724–730.

19. **Ujma Z., Dmytrow D.** Lowfrequency dielectric dispersion in $PbZrO_3$ with oxygen vacancies // Ferroelectrics. 1993. Vol. 150. No. 1. Pp. 351–362.

20. **Shihua D., Tianxiu S., Guobiao L.** The dielectric dispersion properties of $BaTiO_3$ based ferroelectric ceramics doped with Nb/Mn // Ferroelectrics. 2013. Vol. 445. No. 1. Pp. 26–31.

21. **Kajokas A., Matulis A., Banys J., Mizaras R., Brilingas A., Grigas J.** Dielectric dispersion and distribution of the relaxation times of the relaxor PLZT ceramics // Ferroelectrics. 2001. Vol. 257. No. 1. Pp. 69–74.

22. **Барышников С. В., Милинский А. Ю.** Стабилизация полярной фазы нитрата калия, внедренного в нанопористую матрицу титаната бария // Физика твердого тела. 2024. Т. 66. № 5. С. 747–751.

23. **Gaur A., Porwal C., Boukhris I., Chauhan V. S., Vaish R.** Review on multicatalytic behavior of $Ba_{0.85}Ca_{0.15}Ti_{0.9}Zr_{0.1}O_3$ ceramic // Materials. 2023. Vol. 16. No. 16. P. 5710.

REFERENCES

1. **Xiao M., Xu A., Sui Z., et al.,** Multifunctional MEMS, NEMS, micro/nano-structures enabled by piezoelectric and ferroelectric effects, Nanoscale Horizons. 10 (11) (2025) 2744–2771.

2. **Liu Z., Guo Z., Wan H., et al.,** High energy storage capacity, heterogeneous domain structure and stabilization of intermediate phase in $PbZrO_3$-based antiferroelectric single crystals, J. Mater. Chem. C. 10 (17) (2022) 6762–6769.

3. **Liu B., Gaur A. P. S., Cui J., Tan X.,** Substitution of Pb with ($Li_{1/2}Bi_{1/2}$) in $PbZrO_3$-based antiferroelectric ceramics, J. Adv. Dielect. 14 (1) (2024) 2350022.

4. **Zhao T., Li J., Yang X., Yin Z.,** A review of the preparation and application of lead zirconate titanate (PZT) thin film sensors, J. Mater. Chem. C. 13 (31) (2025) 15807–15851.

5. **Wang W., Chen Z., Zhou Z., et al.,** Enhancing electromechanical properties of PZT-based piezoelectric ceramics by high-temperature poling for high-power applications, ACS Appl. Mater. Interfaces. 15 (12) (2023) 15636–15645.

6. **Sawaguchi E., Maniwa H., Hoshino S.,** Antiferroelectric structure of lead zirconate, Phys. Rev. 83 (5) (1951) 1078.

7. **Jona F., Shirane G., Mazzi F., Pepinsky R.,** X-ray and neutron diffraction study of antiferroelectric lead zirconate, $PbZrO_3$, Phys. Rev. 105 (3) (1957) 849–856.

8. **Tennery V. J.,** High-temperature phase transitions in $PbZrO_3$, J. Amer. Ceram. Soc. 49 (9) (1966) 483–486.

9. **Scott B. A., Burn G.,** Crystal growth and observation of the ferroelectric phase of $PbZrO_3$, J. Amer. Ceram. Soc. 55 (7) (1972) 331–333.

10. **Khushbu N., Kumar P.,** Effect of sintering temperature on structural, dielectric and ferroelectric properties of $BaTiO_3$-$PbZrO_3$ ceramics, Ferroelectrics. 516 (1) (2017) 167–172.

11. **Chen H.,** Effects of grain size on domain structure and ferroelectric properties of barium zirconate titanate ceramics, J. Alloys Compnd. 480 (2) (2009) 870–873.

12. **Baryshnikov S. V., Milinsky A. Yu., Stukova, E. V.,** Ferroelectric phase in $PbZrO_3$ ceramics stabilized by $BaTiO_3$ nanoparticle addition, Glas. Ceram. 82 (9–10) (2026) 402–405.

13. **Bakhtiar S. U. H., Hussain S. A., Ali S., et al.,** Innovative perspectives on porous ferroelectric ceramics and their composites: charting new frontiers in energy applications, Mat. Today Commun. 38 (Mar) (2024) 108388.

14. **Guerra J. D. S., Peláiz-Barranco A., Silva A. C., Calderyn-Picar F.,** Figures of merit of PLZT ferroelectric ceramics for practical applications, Ferroelectr. 611 (1) (2023) 138–149.

15. **Zhou X., Gong H., Zhang J., et al.,** Pore structure-dependent pyroelectric properties of porous PZT ceramics fabricated by template method, J. Mat. Chem. A. 13 (47) (2025) 40689–40697.

16. **Wang Q., He Sh., Bowen C. R., et al.,** Porous pyroelectric ceramic with carbon nanotubes for high-performance thermal to electrical energy conversion, Nano Energy. 102 (Nov) (2022) 107703.

17. **Glass A. M.,** Investigation of the electrical properties of $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$ with special reference to pyroelectric detection, J. Appl. Phys. 40 (12) (1969) 4699–4713.

18. **Sotnikova G. Yu., Zelenovskiy P. S., Ushakov A. D., et. al.,** Pyroelectric effect in doped nonpolar glycine crystals, Tech. Phys. 68(1) (2023) S125–S131.

19. **Ujma Z., Dmytrow D.,** Lowfrequency dielectric dispersion in $PbZrO_3$ with oxygen vacancies, Ferroelectr. 150 (1) (1993) 351–362.

20. **Shihua D., Tianxiu S., Guobiao L.,** The dielectric dispersion properties of $BaTiO_3$ based ferroelectric ceramics doped with Nb/Mn, Ferroelect. 445 (1) (2013) 26–31.

21. **Kajokas A., Matulis A., Banys J., et. al.,** Dielectric dispersion and distribution of the relaxation times of the relaxor PLZT ceramics, Ferroelectr. 257 (1) (2001) 69–74.

22. **Baryshnikov S. V., Milinsky A. Y.,** Stabilization of the polar phase of potassium nitrate, embedded in a nanoporous barium titanate matrix, Phys. Solid State. 66 (5) (2024) 722–725.

23. **Gaur A., Porwal C., Boukhris I., et. al.,** Review on multicatalytic behavior of $Ba_{0.85}Ca_{0,15}Ti_{0.9}Zr_{0.1}O_3$ ceramic, Materials. 16 (16) 5710.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

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

svbar2003@list.ru

ORCID: 0000-0002-3362-8975

МИЛИНСКИЙ Алексей Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.*
675000, Россия, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
a.milinskiy@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7525-4396

СТУКОВА Елена Владимировна – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики, исполняющая обязанности заведующей кафедрой физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.*
675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
lenast@bk.ru
ORCID: 0000-0002-7981-7456

THE AUTHORS

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

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

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

Статья поступила в редакцию 30.03.2026. Одобрена после рецензирования 06.05.2026. Принята 06.05.2026.
Received 30.03.2026. Approved after reviewing 06.05.2026. Accepted 06.05.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 537.9
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19303

АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНО-ЧАСТОТНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ УДЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ВАНИЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ

С. С. Хвиюзов [1] ✉, А. С. Волков [2]

[1] Федеральный исследовательский центр комплексного изучения Арктики имени академика Н. П. Лаверова Уральского отделения РАН, г. Архангельск, Россия;

[2] Северный (Арктический) федеральный университет имени М. В. Ломоносова, г. Архангельск, Россия

✉ khviyuzov.s@yandex.ru

Аннотация. Методом импедансной спектроскопии определены значения удельной электропроводности (УЭ) ванилиновой кислоты в диапазонах частот 10 мГц – 10 МГц и температур 153 – 433 K. Показан степенной характер частотных зависимостей УЭ исследуемого объекта. На основе уравнения Йоншера выделены высоко-, средне- и низкочастотные составляющие указанных зависимостей, которые соотнесены с функциональными группами в структуре винилиновой кислоты, участвующими в переносе зарядов. Проводимость в области низких частот связана с карбоксильными и метоксильными группами, средних – с фенольными гидроксильными группами, участвующими в переносе заряда. В высокочастотной области носителями заряда являются π-электроны бензольного кольца молекулы. На основе уравнения Аррениуса были найдены значения энергии активации проводимости. В итоге доказан прыжковый механизм электропроводности в выбранном температурном интервале.

Ключевые слова: ванилиновая кислота, удельная электропроводность, уравнение Йоншера, уравнение Аррениуса, прыжковая проводимость

Финансирование: Исследования проведены в рамках Государственного задания ФГБУН ФИЦКИА УрО РАН 2025–2027 гг. № 125021902595-1.

Для цитирования: Хвиюзов С. С., Волков А. С. Анализ температурно-частотных зависимостей удельной электропроводности ванилиновой кислоты // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 27–34. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19303

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19303

AN ANALYSIS OF TEMPERATURE-FREQUENCY DEPENDENCES OF SPECIFIC CONDUCTIVITY OF VANILLIC ACID

S. S. Khviyuzov [1] ✉, A. S. Volkov [2]

[1] N. P. Laverov Federal Center for Integrated Arctic Research of the Ural Branch of RAS, Arkhangelsk, Russia;

[2] Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

✉ khviyuzov.s@yandex.ru

Abstract. The values of specific electrical conductivity (SEC) of vanillic acid samples have been measured in the frequency range from 10 mHz to 10 MHz, over a temperature range between 153 and 433 K, using impedance spectroscopy. The frequency dependence of the object's SEC was shown to obey a power law. Based on the Jonscher equation, three frequency components of the SEC were identified. They were correlated with functional groups involved

© Хвиюзов С. С., Волков А. С., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

in charge transfer in the molecule. The conductivity in the low-frequency region was associated with carboxyl and methoxyl groups, and it was with phenolic hydroxyl groups involved in charge transfer in the medium frequency region. The π electrons of the benzene ring of the molecule were charge carriers in the high-frequency region. Based on the Arrhenius equation, the values of the activation energy of conductivity were found. As a result, the hopping mechanism of electrical conductivity in the selected temperature range was proven.

Keywords: vanillic acid, specific conductivity, Jonscher equation, Arrhenius equation, hopping conductivity

Funding: This reported study was carried out within the framework of the State Assignment to N. Laverov Federal Center for Integrated Arctic Research of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences, (No. 125021902595-1, years 2025–2027).

For citation: Khviyuzov S. S., Volkov A. S., An analysis of temperature-frequency dependences of specific conductivity of vanillic acid, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 27–34. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19303

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

Введение

Ароматические соединения находят широкое применение в электротехнике в качестве полупроводников и диэлектриков в светоизлучающих устройствах и сенсорах, поэтому их исследования представляют значительный практический интерес. Важное направление работ по этой тематике – синтез полиароматических соединений с различными донорно-акцепторными заместителями [1]. При этом ароматические соединения могут быть получены из лигнина, содержащегося в растениях (его концентрация достигает в них 35%). Одним из путей переработки лигнинов является получение низкомолекулярных соединений, в том числе ванилиновой кислоты.

Указанная кислота используется в пищевой и фармацевтической промышленности, в органическом синтезе при получении полимеров и низкомолекулярных фенолов. Производство ванилиновой кислоты осуществляется методом химического синтеза, где в качестве исходных продуктов используется гваякол, изоэвгенол и лигнин [2].

Лигнин и низкомолекулярные фенольные соединения относятся к диэлектрикам, в которых основным механизмом движения зарядов является активационный или «прыжковый» [3]. В зависимости от физической природы носителей заряда электропроводность диэлектриков бывает электронной, поляронной и ионной. Среди механизмов переноса заряда выделяют дрейфовый, прыжковый и диффузионный. Заряженные частицы под воздействием электрического поля могут ограниченно перемещаться в диэлектрике по степенному закону Йоншера для удельной электропроводности σ, который имеет вид

$$\sigma \sim f^n, \text{ где } 0{,}7 < n < 1{,}0,$$

причем показатель степени n зависит от температуры ввиду взаимосвязи времени релаксации и частоты f [4]. Использование степенного закона Йоншера позволяет выделять различные механизмы прыжковой проводимости [5, 6].

Другими словами, сложный вид частотных зависимости удельной электропроводности диэлектриков обусловлен наличием нескольких механизмов проводимости с участием различных структурных групп, вовлеченных в процесс переноса заряда. Анализ функций $\sigma(f)$ для смесей сложного состава возможен на основе степенных зависимостей вида $\sigma \sim f^n$. Для соединений сложного химического состава необходимо устанавливать влияние функциональной природы.

Цель данной работы – анализ частотных зависимостей удельной электропроводности ванилиновой кислоты как полифункционального соединения.

В связи с указанной целью были поставлены задачи выявления отдельных частотных составляющих удельной электропроводности и оценки энергии активации проводимости функциональных групп, участвующих в переносе заряда.

© Khviyuzov S. S., Volkov A. S., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Материалы и методы

Коммерческий продукт ванилиновая (4-гидрокси-3-метоксибензойная) кислота $C_8H_8O_4$ (более 97%, Fluka, Германия) представляет собой кристаллический мелкодисперсный порошок с температурами плавления и кипения 483 и 626 K, соответственно. Дипольный момент молекулы составляет (в зависимости от конформационного состояния) от 1,50 до 4,05 Д [7].

Перед проведением измерений воздушно-сухую навеску порошкообразного образца высушивали при температуре 298 K и давлении 10 мм рт. ст. в течение 24 ч над силикагелем в вакуумном сушильном шкафу (Миус, Россия) до остаточной влажности не более 1 %.

Электрические характеристики были определены с помощью широкополосного диэлектрического спектрометра BDS Novocontrol Concept 80 (Германия) в диапазоне частот переменного электрического поля 10 мГц – 10 МГц и в температурном интервале (153 – 453) K с шагом 20 K.

Термостатирование осуществлялось в парах жидкого азота с помощью криосистемы Novocontrol Quatro. Для измерений использовали альфа-анализатор и активную ячейку ZGS 1200. Порошок массой 2,0 г помещали в круглую ячейку (плоский конденсатор диаметром 2,2 см с расстоянием между электродами 4,5 мм). Герметичность ячейки обеспечивалась цилиндрической полой тефлоновой прокладкой, электрическая проводимость которой много меньше таковой для образца (под образцом здесь подразумевается цилиндрический объем порошка в форме таблетки).

Действительная часть удельной электрической проводимости образца рассчитывалась с учетом геометрических параметров измерительной ячейки и проводимости тефлоновой прокладки σ_t с помощью программного обеспечения диэлектрического спектрометра WinDeta:

$$\sigma = GSd^{-1} - \sigma_t, \quad (1)$$

где G, См, – электрическая проводимость образца; S, м^2, – площадь оснований цилиндрического объема образца; d, м, – его толщина.

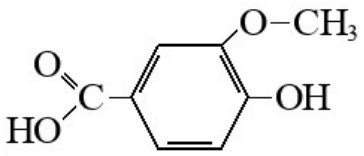


Рис. 1. Структурная формула ванилиновой кислоты

Ванилиновая кислота содержит характерные для лигнинов функциональные группы, сопряженные с бензольным кольцом: карбоксильную –COOH, фенольную гидроксильную –OH и метоксильную – OCH_3 группы (рис. 1). Молекула имеет два кислотных полярных центра. Как материал ванилиновая кислота проявляет свойства полярного диэлектрика.

Результаты и их обсуждение

Стоит начать с более подробного описания физико-химических свойств исследуемого материала. Значение показателя кислотности pK_a (K_a – константа кислотной диссоциации) в водной среде фенольной гидроксильной группы составляет 9,5 ед., карбоксильной – 4,5 ед. [8]. В результате суммарного действия индуктивного и мезомерного (I- и M-) электронных эффектов заместителей, электронная плотность на бензольном кольце в молекуле ванилиновой кислоты оказывается наименьшей среди мономерных фенолов, моделирующих структурное звено хвойного лигнина. Индуктивный I-эффект вызван смещением электронной плотности по цепи σ-связей в молекуле за счет разницы электроотрицательностей атомов или групп атомов; мезомерный M-эффект вызван перераспределением электронной плотности в сопряженных системах через π-связи. Карбоксильная группа за счет отрицательных индуктивного (–0,50 относительно атома водорода) и мезомерного (–0,20) эффектов проявляет электроноакцепторные свойства и снижает электронную плотность в бензольном кольце. Фенольная гидроксильная (–OH) и метоксильная (–OCH_3) группы за счет $-I$-эффекта (–0,50 и –0,45) и большего $+M$-эффекта (+0,68 и +0,52), соответственно, обладают электронодонорными свойствами и повышают электронную плотность на бензольном кольце [9].

Различия в дипольных моментах приводят к дисперсии поляризации в переменных электрических полях. Исследования с использованием широкого частотного диапазона позволяют оценивать эффекты, обусловленные поляризацией диполей, атомов и электронов. Выбранный температурный диапазон 153 – 453 K соответствует твердому агрегатному состоянию исследуемой ванилиновой кислоты. Данные термогравиметрического анализа показывают ее устойчивость при температуре T ниже 473 K, потеря массы не превышает 5 % вследствие удаления химически связанной воды [10].

Полученные нами частотно-температурные зависимости удельной электропроводности σ ванилиновой кислоты представлены на рис. 2.

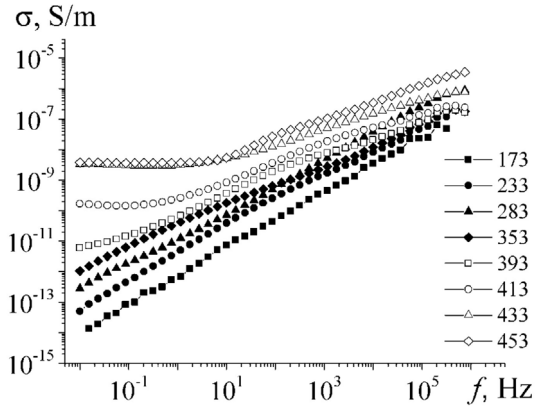


Рис. 2. Частотно-температурные зависимости удельной электропроводности ванилиновой кислоты; f – частота переменного электрического поля; числа в легенде указывают значения температуры (в K)

Зависимость σ(f) характеризуется степенной функцией, причем в разных частотных диапазонах ее можно описать собственной степенной функцией на основе уравнения Йоншера $\sigma \sim f^n$:

$$\sigma(f)=\begin{cases}\sigma_{DC}, f\to 0,\\ Af^{\alpha}, f\in\left[10^{-2};10\right]\text{Hz},\\ Bf^{\beta}, f\in\left[10;10^{3}\right]\text{Hz},\\ Cf^{\gamma}, f\in\left[10^{3};10^{7}\right]\text{Hz},\end{cases} \quad (2)$$

где σ_{DC}, См/м, – удельная электропроводность на постоянном токе; α, β, γ – показатели степени, зависящие от температуры и характеризующие свойства функциональных групп, участвующих в переносе заряда по веществу; параметры A, B и C характеризуют интенсивность поляризации.

Вообще говоря, уравнение (2) принято формулировать через частоту $\omega = 2\pi f$, но в данном случае целесообразны формулы с частотой f. Сложный вид уравнения (2) свидетельствует о наличии различных механизмов проводимости или разных групп, участвующих в переносе заряда для соответствующих частотных диапазонов.

Значения величины σ_{DC} определяли через аппроксимацию зависимости σ(f) при $f \to 0$; это оказалось возможным только при температурах свыше 413 K. Ниже этого значения, в низкочастотной области наблюдается выраженная зависимость σ(f), что приводит к высоким погрешностям при определении σ_{DC}. Например, при T = 413 K значение σ_{DC} составляло $1{,}5\cdot10^{-10}$ См/м, а при T = 433 и 453 K было $\sigma_{DC} = 3{,}4\cdot10^{-9}$ См/м. Для сравнения целесообразно привести значение σ_{DC} для фенолформальдегидной смолы: $\sigma_{DC} = 2{,}3\cdot10^{-10}$ См/м при T = 298 K [11].

На основе анализа первой (σ′) и второй (σ″) производных для температурного интервала от 233 до 393 K, на зависимостях σ(f) нами было выделено три частотных диапазона: низко-, средне- и высокочастотный, которые охарактеризованы параметрами, входящими в формулы (2). Затем по данным частотно-температурных зависимостей мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости ε″(f) для лигнина и соединений, моделирующих его структурные звенья, было выделено три релаксационных процесса с участием функциональных групп и π-электронов бензольного кольца [12 – 15].

Из сопоставления этих данных следует, что параметры низкочастотной проводимости A и α отражают участие в переносе зарядов карбоксильной (–COOH) и метоксильной ($-OCH_3$) группами. В среднечастотной области, характеризуемой параметрами B и β, участвуют фенольные гидроксильные (–OH) группы ванилиновой кислоты, а также водородные связи ее молекулы. К гидроксильным группам также следует отнести остаточное содержание химически связанной воды, где проявляются L- и D-ориентационные структурные, а также ионные дефекты H_3O^+ и OH^-. Наличие L- и D-дефектов вызвано взаимным расположением связей O–H в структуре льда: для L-типа характерно отсутствие атомов водорода между соседними атомами кислорода (–O O–), для D-дефекта –

взаимное расположение связей O–H H–O с отсутствием кислорода между атомами водорода. Точечные ионные дефекты, образованные ионами H_3O^+ и OH^-, возникают при ионизации молекул воды и обеспечивают протонную проводимость. В высокочастотной области (с параметрами *C* и γ), в качестве носителей заряда участвуют π-электроны бензольного кольца. Значения коэффициентов уравнения (2) были найдены по кривым зависимостей σ(*f*), аппроксимированных степенной функцией вида

$$\sigma = \sigma_0 f^n, \quad (3)$$

где σ_0 имеет смысл параметров *A*, *B*, *C* (См/м), а показатель степени *n* – параметров α, β, γ в соответствующих частотных диапазонах (рис. 3).

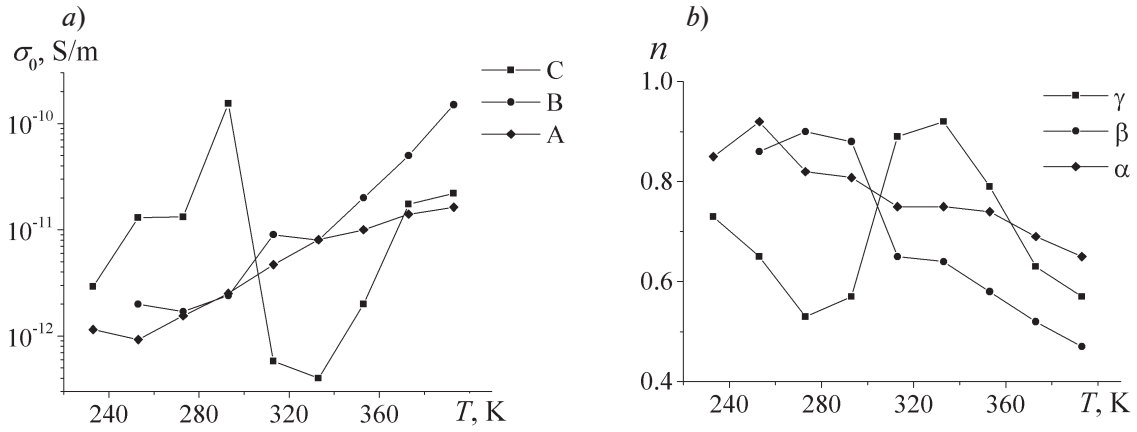


Рис. 3. Температурные зависимости параметров σ_0 (*a*) и *n* (*b*) уравнения (3) в трех частотных диапазонах, характеризуемых параметрами (*A*, α), (*B*, β) и (*C*, γ) на основе уравнения Йоншера

Монотонное, близкое к линейному, изменение коэффициентов степенной функции (2) наблюдается только для низко- и среднечастотной областей. С учетом выполняемости закона Аррениуса, энергия активации проводимости для низко- и среднечастотной областей составила 0,18 и 0,51 эВ, соответственно. Значения показателей степени *n* от 0,47 до 0,92 свидетельствуют о прыжковом механизме проводимости во всем исследуемом диапазоне частот.

Зависимости величины σ от обратной температуры (T^{-1}) на различных частотах переменного электрического поля представлены на рис. 4, *a*. Видно, что в диапазоне частот 1,15 кГц – 1,15 МГц и температурном интервале 213 – 333 K наблюдается экстремум вблизи значения 293 K, обусловленный структурным переходом, совершаемым ввиду изменения сетки слабых внутримолекулярных водородных связей с энергией около 7 кДж/моль; водородные связи образуются с участием функциональных групп молекулы. При этом высокоэнергетические межмолекулярные водородные связи (до 60 кДж/моль) между карбоксильными группами различных молекул, обеспечивающих кристаллическую структуру вещества, не претерпевают разрушения [7, 16, 17].

Область температурного экстремума при *T* = 293 K была разбита на две области, которые удалось удовлетворительно описать уравнением Аррениуса:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \exp(-E_a/kT), \text{ или } \ln\sigma = \ln\sigma_0 - E_a/kT, \quad (4)$$

где E_a, эВ, – энергия активации проводимости.

Для высоко- и низкотемпературной областей полученные значения E_a в зависимости от частоты внешнего электрического поля приведены на рис. 4, *b*.

При снижении частоты от 1 МГц до 0,1 мГц и при температуре *T* свыше 293 K значения E_a линейно возрастают от 0,55 до 1,00 эВ, а при температуре *T* ниже 293 K значения Еа претерпевают рост от 0,40 до 0,60 эВ с максимумом при 0,55 эВ. Важно отметить, что значения энергии активации ниже 1 эВ характерны для прыжкового механизма проводимости диэлектрика.

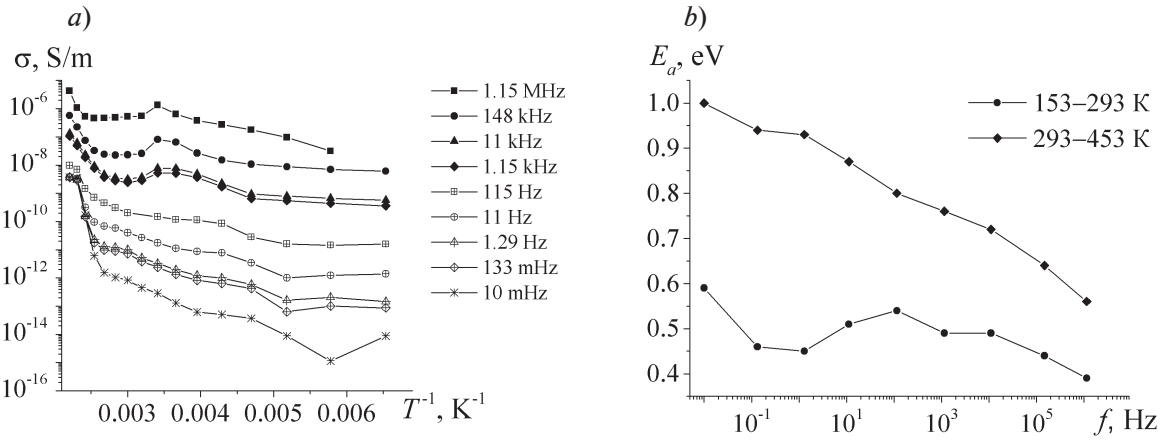


Рис. 4. Зависимости удельной электропроводности от обратной температуры на различных частотах внешнего электрического поля (*a*) и энергии активации проводимости от частоты для двух температурных интервалов (*b*)

Заключение

Методом импедансной спектроскопии получены частотно-температурные зависимости удельной электрической проводимости ванилиновой кислоты в диапазонах частот 10 мГц – 10 МГц и температур 153 – 433 K. Выявлено наличие трех частотных диапазонов удельной электропроводности, охарактеризованных степенными функциями на основе уравнения Йоншера. Проводимость порошкообразной ванилиновой кислоты обеспечивается разными функциональными группами ее молекул, участвующими в переносе заряда: в области низких частот это карбоксильные и метоксильные группы, средних частот – это гидроксильные группы. В высокочастотной области носителями заряда являются π-электроны бензольного кольца молекулы. Результаты оценки энергии активации проводимости групп, участвующих в переносе заряда, указывают на прыжковый механизм проводимости ванилиновой кислоты в изученных частотном и температурном диапазонах.

Полученные в работе результаты рекомендуется использовать при оценке изменения электропроводящих свойств низкомолекулярных ароматических соединений (а также лигнинного полимера) в процессе их окисления, поскольку структурные звенья макромолекул соединены труднополяризуемыми (C–C)-связями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Wu Z., He J., Yang H, Yang S.** Progress in aromatic polyimide films for electronic applications: Preparation, structure and properties // Polymers. 2022. Vol. 14. No. 6. P. 1269.

2. **Dandekar P., Wasewar K. L.** Experimental investigation on extractive separation of vanillic acid // Chemical Data Collections. 2020. Vol. 30. December. P. 100564.

3. **Khviyuzov S. S., Volkov A. S.** Influence of ionic impurities on the dielectric properties of lignin // Polymers for Advanced Technologies. 2024. Vol. 35. No. 6. P. e6467.

4. **Jonscher A. K.** Dielectric relaxation in solids // Journal of Physics D: Applied Physics. 1999. Vol. 32. No. 14. Pp. 57–70.

5. **Jena S. K., Joshi D. C., Ghosh S., Dasari K., Thota S.** Dynamical response of localized electron hopping and dipole relaxation in $Cu_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ magnetoceramics // Journal of Physics D: Applied Physics. 2021. Vol. 54. No. 42. P. 425303.

6. **Maruthi R., Deshpande S. K., Deshmukh V., Singh K., Thota S.** Correlated barrier charge hopping and non-Debye relaxation in columbite $MnNb_2O_6$ // Journal of Physics D: Applied Physics. 2023. Vol. 56. No. 2. P. 025501.

7. **de Oliveira T. S., Ghosh A., Chaudhuri P.** Exploring the hydrogen-bonded interactions of vanillic acid with atmospheric bases: a DFT study // Structural Chemistry. 2024. Vol. 35. No. 5. Pp. 1601–1611.

8. **Ragnar M., Lindgren C. T., Nilvebrant N. O.** pK_a values of guaiacyl and syringyl phenols related to lignin // Journal of Wood Chemistry and Technology. 2000. Vol. 20. No. 3. Pp. 277–305.

9. **Беккер Г. О.** Введение в электронную теорию органических реакций. Пер. с нем. М.: Мир, 1977. 658 с.

10. **Sazanov Yu. N., Goykhman M. Ya., Podeshvo I. V., Fedorova G. N., Mikhailov G. M., Kudriavtsev V. V.** Thermochemistry of polymers based on vanillic acid // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 1999. Vol. 55. No. 3. Pp. 721–726.

11. **Li Y-C., Lee S-Y., Wang H., Jin F-L., Park S-J.** Enhanced electrical properties and impact strength of phenolic formaldehyde resin using silanized graphene and ionic liquid // ACS Omega. 2024. Vol. 9. No. 1. Pp. 294–303.

12. **Боголицын К. Г., Хвиюзов С. С., Волков А. С., Копосов Г. Д., Гусакова М. А.** Широкополосная диэлектрическая спектроскопия лигнина // Журнал физической химии. 2019. Т. 93. № 2. С. 307–312.

13. **Kaminska E., Kaminski K., Paluch M., Ngai K. L.** Primary and secondary relaxations in supercooled eugenol and isoeugenol at ambient and elevated pressures: Dependence on chemical microstructure // The Journal of Chemical Physics. 2006. Vol. 124. No. 16. P. 164511.

14. **Volkov A. S., Koposov G. D., Khviyuzov S. S.** Features of the temperature-frequency dependences of the electrophysical properties of vanillin alcohol as a model lignin compound // Chemical Physics. 2021. Vol. 548. 1 August. P. 111202.

15. **Волков А. С., Хвиюзов С. С.** Анализ температурно-частотных зависимостей диэлектрической проницаемости и удельной проводимости ванилина // Оптика и спектроскопия. 2025. Т. 133. № 2. С. 134–140.

16. **Cocinero E. J., Lesarri A., Écija P., Basterretxea F., Fernández J. A., Castaño F.** Competing hydrogen bonding in methoxyphenols: The rotational spectrum of *o*-vanillin // Journal of Molecular Spectroscopy. 2011. Vol. 267. No. 1–2. Pp. 112–117.

17. **Beni A. S., Chermahini A. N., Sharghi H.** Theoretical studies of hydrogen bond interactions in 4-substituted benzoic acids dimers // Journal of the Korean Chemical Society. 2011. Vol. 55. No. 3. Pp. 392–399.

REFERENCES

1. **Wu Z., He J., Yang H, Yang S.,** Progress in aromatic polyimide films for electronic applications: Preparation, structure and properties, Polymers. 14 (6) (2022) 1269.

2. **Dandekar P., Wasewar K. L.,** Experimental investigation on extractive separation of vanillic acid, Chem. Data Collect. 30 (Dec) (2020) 100564.

3. **Khviyuzov S. S., Volkov A. S.,** Influence of ionic impurities on the dielectric properties of lignin, Polym. Adv. Technol. 35 (6) (2024) e6467.

4. **Jonscher A. K.,** Dielectric relaxation in solids, J. Phys. D: Appl. Phys. 32 (14) (1999) 57–70.

5. **Jena S. K., Joshi D. C., Ghosh S., et al.,** Dynamical response of localized electron hopping and dipole relaxation in $Cu_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ magnetoceramics, J. Phys. D: Appl. Phys. 54 (42) (2021) 425303.

6. **Maruthi R., Deshpande S. K., Deshmukh V., et al.,** Correlated barrier charge hopping and non-Debye relaxation in columbite $MnNb_2O_6$, J. Phys. D: Appl. Phys. 56 (2) (2023) 025501.

7. **de Oliveira T. S., Ghosh A., Chaudhuri P.,** Exploring the hydrogen-bonded interactions of vanillic acid with atmospheric bases: a DFT study, Struct. Chem. 35 (5) (2024) 1601–1611.

8. **Ragnar M., Lindgren C. T., Nilvebrant N. O.,** pK_a values of guaiacyl and syringyl phenols related to lignin, J. Wood Chem. Technol. 20 (3) (2000) 277–305.

9. **Bekker H.,** Einführung in die Elektronentheorie Organisch-Chemischer Reaktionen [Introduction to the electronic theory of organic reactions], VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, Germany, 1964.

10. **Sazanov Yu. N., Goykhman M. Ya., Podeshvo I. V., et al.,** Thermochemistry of polymers based on vanillic acid, J. Therm. Anal. Calorim. 55 (3) (1999) 721–726.

11. **Li Y-C., Lee S-Y., Wang H., et al.,** Enhanced electrical properties and impact strength of phenolic formaldehyde resin using silanized graphene and ionic liquid, ACS Omega. 9 (1) (2024) 294–303.

12. **Bogolitsyn K. G., Khviyuzov S. S., Volkov A. S., et al.,** Broadband dielectric spectroscopy of lignin, Russ. J. Phys. Chem. A. 93 (2) (2019) 353–358.

13. **Kaminska E., Kaminski K., Paluch M., Ngai K. L.,** Primary and secondary relaxations in supercooled eugenol and isoeugenol at ambient and elevated pressures: Dependence on chemical microstructure, J. Chem. Phys. 124 (16) (2006) 164511.

14. **Volkov A. S., Koposov G. D., Khviyuzov S. S.,** Features of the temperature-frequency dependences of the electrophysical properties of vanillin alcohol as a model lignin compound, Chem. Phys. 548 (1 Aug) (2021) 111202.

15. **Volkov A. S., Khviyuzov S. S.,** Analysis of temperature-frequency dependences of dielectric permittivity and specific conductivity of vanillin, Opt. Spectrosc. 133 (2) (2025) 125–131.

16. **Cocinero E. J., Lesarri A., Écija P., et al.,** Competing hydrogen bonding in methoxyphenols: The rotational spectrum of *o*-vanillin, J. Mol. Spectrosc. 267 (1–2) (2011) 112–117.

17. **Beni A. S., Chermahini A. N., Sharghi H.,** Theoretical studies of hydrogen bond interactions in 4-substituted benzoic acids dimers, J. Korean Chem. Soc. 55 (3) (2011) 392–399.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ХВИЮЗОВ Сергей Сергеевич – *кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории химии растительных биополимеров ФГБУН Федерального исследовательского центра комплексного изучения Арктики имени академика Н. П. Лаверова Уральского отделения Российской академии наук, г. Архангельск, Россия.*

163020, Россия, г. Архангельск, Никольский пр., 20
khviyuzov.s@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-4810-2378

ВОЛКОВ Александр Сергеевич – *старший преподаватель кафедры фундаментальной и прикладной физики Северного (Арктического) федерального университета имени М. В. Ломоносова, г. Архангельск, Россия.*

163002, Россия, г. Архангельск, наб. Северной Двины, 17
a.s.volkov@narfu.ru
ORCID: 0000-0002-3816-3441

THE AUTHORS

KHVIYUZOV Sergey S.
N. Laverov Federal Center for Integrated Arctic Research of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences
20, Nikolsky Ave., Arkhangelsk, 163020, Russia
khviyuzov.s@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-4810-2378

VOLKOV Aleksandr S.
Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov
17, Severnaya Dvina Emb., Arkhangelsk, 163002, Russia
a.s.volkov@narfu.ru
ORCID: 0000-0002-3816-3441

Статья поступила в редакцию 17.12.2025. Одобрена после рецензирования 15.04.2026. Принята 15.04.2026.
Received 17.12.2025. Approved after reviewing 15.04.2026. Accepted 15.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья
УДК 533.9
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19304

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЦЕНАРИЕВ РАБОТЫ СИСТЕМЫ СМЯГЧЕНИЯ ПОСЛЕДСТВИЙ СРЫВА РАЗРЯДА В ТОКАМАКЕ ТРТ

С. О. Башкатов ✉, В. Ю. Сергеев, В. Г. Капралов
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ bashkatov.so@edu.spbstu.ru

Аннотация. В работе приведены результаты численного моделирования временной эволюции тока плазмы и подавления тока убегающих электронов (REs) в токамаке с реакторными технологиями во время срыва разряда токамака с помощью инжекции вольфрамовых коллекторов, которые собирают REs. Проведено сравнение эффективности подавления тока REs методами инжекции коллекторов и массивным напуском рабочего газа – дейтерия. При решении системы из двух дифференциальных уравнений для токов плазмы и REs используется нуль-мерный подход и учтены потери REs на вольфрамовом коллекторе за время его пролета через плазму на стадии вывода тока разряда. Результаты моделирования показали, что наиболее перспективна комбинированная система смягчения срыва, которая запускает инжекцию аргона либо дейтерия в сценарии невынужденного срыва и производит инжекцию аргона и трех массивных (230 г) коллекторов со скоростями 450 м/с в сценарии невынужденного срыва.

Ключевые слова: токамак, срыв тока, ток лавины убегающих электронов, коллектор убегающих электронов

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Госкорпорации «Росатом» и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках федерального проекта «Технологии термоядерной энергетики» нового национального проекта технологического лидерства «Новые атомные и энергетические технологии», проект № FSEG-2025-0002 «Разработка принципов и систем управления и диагностики плазмы токамаков с помощью инжекции вещества».

Для цитирования: Башкатов С. О., Сергеев В. Ю., Капралов В. Г. Моделирование сценариев работы системы смягчения последствий срыва разряда в токамаке ТРТ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 35–51. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19304

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19304

SIMULATION OF OPERATIONAL SCENARIOS FOR A SYSTEM MITIGATING THE CONSEQUENCES OF A DISCHARGE DISRUPTION IN THE TRT TOKAMAK

S. O. Bashkatov ✉, V. Yu. Sergeev, V. G. Kapralov
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ bashkatov.so@edu.spbstu.ru

© Башкатов С. О., Сергеев В. Ю., Капралов В. Г., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. This paper presents the results of numerical simulation of the temporal evolution of the plasma current and runaway electron (RE) current suppression in the tokamak reactor facility during a tokamak disruption using the injection of tungsten collectors absorbing REs. The efficiency of methods of the RE current suppression was compared using the collector injection and massive injection of working gas – deuterium. A zero-dimensional approach was used to solve a system of two differential equations for the plasma and RE currents, taking into account RE losses on the tungsten collector that occurred during their passage through the plasma at the discharge current quench stage. The simulation results showed that the most promising disruption mitigation system is a combined one, which initiates the injection of argon or deuterium in the intended disruption scenario and injects argon and three massive (230 g) collectors at velocities of 450 m/s in the unintended disruption scenario.

Keywords: tokamak, current disruption, avalanche current of runaway electrons, collector of runaway electrons

Funding: The reported study was funded by the State Atomic Energy Corporation ROSATOM and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the Federal Project "Fusion Energy Technologies" of National Project "New Atomic and Energy Technologies"; Project No. FSEG-2025-0002: "The development of principles and systems for control and diagnostics of tokamak plasma using substance injection".

For citation: Bashkatov S. O., Sergeev V. Yu., Kapralov V. G., Simulation of operational scenarios for a system mitigating the consequences of a discharge disruption in the TRT tokamak, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 35–51. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19304

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

Введение

К одной из важнейших проблем в достижении управляемого термоядерного синтеза относится срыв разряда токамака, предотвращение которого необходимо для практического использования термоядерных установок с магнитным удержанием плазмы. Как известно, наибольший интерес представляют исследования разрядов с параметрами, значения которых близки к значениям параметров зажигания [1]. При таких условиях тепловая энергия плазмы и магнитная энергия тока достигают значений, представляющих серьезную опасность для целостности установки при неконтролируемом срыве разряда токамака [2]. В связи с этим для безопасной работы установки необходимы исследования и разработки в области предотвращения срывов, но пока эти изыскания находятся лишь на ранней стадии [2]. Кроме того, необходима работа над системами смягчения последствий уже произошедшего срыва (*англ.* Disruption Mitigation System (DMS)).

На установке токамака с реакторными технологиями (TRT), обладающего малым радиусом $a = 0{,}57$ м, большим радиусом $R = 2{,}2$ м и вытянутостью $k_{el} = 1{,}8$, предполагается работа со значениями параметров, близкими к тем, которые должны быть в будущем термоядерном реакторе [3, 4]:

ток плазмы $I_{p0} \cong 5$ МА,

плотность плазмы $n_{e0} \cong 10^{20}$ м$^{-3}$,

температура плазмы $T_{e0} \cong 10$ кэВ,

индукция магнитного поля для удержания плазмы $B_t \cong 8$ Тл.

Ясно, что существует опасность неконтролируемого срыва на данной установке, который может вызвать повреждения вакуумной камеры. Для исключения такого сценария необходимы разработка и внедрение системы смягчения срыва разряда DMS, как это делается для современных крупных токамаков и для токамака-реактора ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor); ITER – это международный научно-исследовательский проект по строительству первого в мире термоядерного реактора типа токамак (расположен во Франции) [5].

© Bashkatov S. O., Sergeev V. Yu., Kapralov V. G., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Сценарии работы системы DMS при аварийном выключении разряда в TRT

На сегодняшний день разрабатывается DMS по двум сценариям работы такой системы [6]. Сценарий срыва № 1 подразумевает успешное предсказание аварии за промежуток времени $\Delta_{pr} \cong 15 - 20$ мс [7] до начала невынужденного теплового срыва (*англ.* Thermal Quench (TQ)).

Если предположить, что длительность срабатывания исполнительных элементов доставки вещества внутрь сепаратрисы в современных вариантах DMS, которая составляет 2 – 3 мс, будет заметно меньше Δ_{pr}, то можно ожидать, что за 12 − 17 мс до невынужденного срыва будет выполняться напуск примеси. Так реализуется сценарий вынужденного срыва (TQ) при помощи инжекции газа, например аргона, в количестве, обеспечивающем значения характерного (экспоненциального) времени τ_{CQ} распада тока в определенном диапазоне, на стадии вывода тока разряда CQ (Current Quench) [8, 9]. Это решает проблемы вывода тепловой энергии плазмы на стадиях TQ и CQ, а также смягчения возникающих электромеханических нагрузок на стадии CQ. Для борьбы с током убегающих электронов (*англ.* Runaway Electrons (RE)) на стадии CQ ITER, в статьях [5, 6, 8] предполагается одновременно с напуском аргона осуществлять напуск дейтерия в количестве, заметно превышающем (до 100 раз) общее число частиц в плазме до срыва. Это, как показано в работе [8], позволяет успешно подавлять механизм генерации лавины RE и снижать ток RE до приемлемых значений ($\leq$ 0,15 МА) для условий ITER в режимах без дейтерий-тритиевых (DT) нейтронных потоков, т.е. без активации стенки [10]. В работе [10], посвященной моделированию сценария DMS ITER, продемонстрировано, что при стенке, активированной нейтронами, и значительно выросшем количестве электронов плазмы, начинает действовать механизм генерации RE, обусловленный комптоновским рассеянием гамма-квантов со стенки. В результате, даже в условиях подавления механизма лавины за счет увеличения плотности, не удается снизить ток RE до значений ниже 4,5 МА при любом из рассмотренных сценариев. Заметим также, что значительный напуск дейтерия при срабатывании DMS может негативно сказываться на других технологических системах термоядерной установки: откачки, разделения изотопов и т.п. [11].

В работе [11] предлагается альтернативный способ борьбы с током лавины убегающих электронов. Чтобы снизить указанный ток, предлагается инжектировать вольфрамовый коллектор в плазму сразу после стадии вывода тепловой энергии плазмы. Он поглощает RE, генерируемые на стадии CQ, без массивного напуска дейтерия, необходимого для столкновительного механизма подавления генерации лавины RE. Если же предсказание срыва отсутствует, то в момент существенного (зарегистрированного) падения тепловой энергии плазмы в результате невынужденного TQ запускается сценарий срыва № 2.

Надежность запуска обеспечивается наличием сразу нескольких диагностик, измеряющих быструю потерю тепловой энергии в плазме в момент TQ. В этом случае смягчение последствий теплового срыва, естественно, уже невозможно, но смягчение последствий срыва тока на стадии CQ все еще возможно и должно быть достигнуто с высокой надежностью, чтобы избежать повреждения первой стенки из-за выхода на нее магнитной энергии тока плазмы и электромеханических нагрузок. С этой целью производится (так же, как и в сценарии № 1) инжекция примесного газа (например, аргона), который должен обеспечивать временные условия для вывода тока плазмы. Сценарии подавления тока RE в сценарии № 2, согласно результатам работы [6], изучены на сегодня недостаточно как теоретически, так и экспериментально.

Система запуска DMS

Для снижения объема регистрируемых данных, а также для запуска управляющих элементов, обеспечивающих смягчение последствий срыва, необходимо также уметь предсказывать момент начала срыва с высокой точностью. Для этого разрабатывают системы предсказания на основе алгоритмов машинного обучения. Такие системы обучаются на базах данных разрядов, в которых представлено большое количество разных сценариев срыва разряда в установке. Благодаря обучению, указанные системы способны оценивать вероятности срыва в действующих токамаках. Для этой цели системы получают параметры плазмы, которые доступны в режиме реального времени (концентрация, внутренняя индуктивность, запас устойчивости и т.п.), и сопоставляют их с параметрами аналогичных

разрядов. В работе [7] описаны алгоритмы, которые используются в системе предсказаний такого типа и определяют вероятность наступления срыва на основе полученных параметров в каждый момент времени. Такой подход позволяет прогнозировать момент срыва и смягчать его последствия своевременным запуском DMS.

Однако при таком подходе возникает несколько проблем:

во-первых, необходимо оптимизировать набор входных сигналов из экспериментально доступных на вход алгоритма;

во-вторых, отсутствует база данных по срывам на проектируемой установке, т.е. обучение можно проводить лишь на базе соответствующих данных для других установок, а это ухудшает прогноз для начальных экспериментов, пока нет базы данных по срыву для конкретной установки, которая бы обеспечивала наивысшее качество обучения;

в-третьих, возможны не только успешные, но и ложные предсказания для запуска DMS (успешные – это те, которые были сделаны за время, достаточное для срабатывания систем DMS Δ_{pr}; ложные – это те, при которых либо срыв был пропущен, либо не произошел, хотя и был предсказан);

в-четвертых, предсказания срыва не гарантируют успеха, так как максимальные значения их вероятности не достигают 100% (когда нет ложных предсказаний), а вероятность не превышает 70% (при значении 13% ложных срабатываний) и 96% (при значении 28% ложных), и это зависит от имеющегося в распоряжении набора параметров и качества обучения, тогда как требования для успешных предсказаний, предъявляемые к токамакам реакторного масштаба типа ITER, составляют не менее 95% ($\leq$ 5% ложных срабатываний).

Таким образом, необходимо более надежное дублирование запуска системы DMS в сценарии срыва № 1. В сценарии срыва № 2 запуск DMS должен осуществляться по сигналам диагностик, надежно регистрирующих первую стадию срыва, т.е. тепловой срыв.

К таким диагностикам относятся следующие:

диагностики SXR,

быстрые (AUXVD) или SPD-детекторы,

ECE-радиометр на 2-й гармонике электрон-циклотронной частоты,

быстрые измерения диамагнитного сигнала [12].

Схема организации исполнительных элементов DMS в токамаке TRT

Для рабочего режима TRT [3, 4] с параметрами для сценария № 1 (см. выше), при моделировании подавления тока лавины I_{RE} убегающих электронов, предполагается инжекция замороженного аргона (неона) с целью достижения требуемых значений характерного времени распада тока τ_{CQ}. Такая инжекция осуществляется системой инжекции разрушенных макрочастиц SPI (Shattered Pellet Injection) [13] или с помощью быстрого подвижного газового клапана FMGI (Fast Massive Gas Injection) [14]. Она необходима в обоих сценариях DMS, описанных выше.

В качестве исполнительных элементов доставки в плазму примеси аргона (либо неона) и дейтерия предполагаются техника инжекции разрушенных криогенных макрочастиц из соответствующего материала или их смеси SPI [5] или (как успешно реализовано в экспериментах на токамаке Т-10 [14]), техника быстрой массивной инжекции FMGI соответствующего газа или смеси газов FMGI в варианте подвижного газового клапана с специализированным соплом Лаваля. Последний позволяет охлаждать и даже кристаллизовать примесный газ во время его движения в расширяющейся части сопла инжекции, увеличивая при этом направленную скорость газа и небольших замороженных макрочастиц, движущихся вместе с ним. Кроме того, сопло позволяет осуществлять напуск в непосредственной окрестности сепаратрисы. Заметим, что вариант SPI был выбран для ITER [6], поскольку он имеет преимущества перед обычно медленной массовой инжекцией газа (MGI) из газового клапана, расположенного далеко от сепаратрисы.

Эти преимущества таковы:

быстрое проникновение: между временем срабатывания SPI и временем начала взаимодействия примеси с плазмой внутри сепаратрисы гораздо меньше времени Δ_{pr};

бóльшая глубина проникновения внутрь плазмы осколков разрушенных макрочастиц в варианте SPI, по сравнению с глубиной проникновения в случае использования варианта

MGI, ввиду заметно меньшей плотности потока газа вследствие его расширения на пути от клапана до сепаратрисы.

Представляется, что варианты SPI и FMGI необходимо сравнить в экспериментальных условиях на действующих токамаках, чтобы выбрать более удобную и надежную технику инжекции, отвечающую требованиям к DMS.

Возможна дополнительная инжекция с помощью FMGI или с помощью SPI рабочего газа дейтерия для подавления механизма развития тока убегающих электронов «hot-tail», который доминирует в токамаках с операционными параметрами, близкими к ITER [8]. Данный механизм основан на том, что в процессе быстрого охлаждения плазмы во время TQ температура электронов падает на временных масштабах, значительно меньших времени их столкновительной релаксации. Вследствие инерционности функции распределения по скоростям в высокоэнергичной области формируется неравновесный «хвост» – пучок электронов, которые не успевают термализоваться в соответствии с новой низкой температурой. Эти частицы сохраняют высокие скорости, характерные для начальной горячей стадии, и в условиях температуры плазмы, характерной для ITER ($\langle T_e \rangle$ = 10 кэВ), для таких электронов сила динамического трения становится меньше ускоряющей силы продольного электрического поля. В результате эти электроны переходят в режим непрерывного ускорения и становятся убегающими.

Если рассматривать сценарии, не учитывая механизма генерации первичных RE за счет эффекта Комптона [10], то проблема подавления тока лавины RE становится решаемой. Соответствующие оценки, сделанные в этой работе, будут представлены ниже.

Альтернативный способ борьбы с током лавины убегающих электронов был предложен в статье [11], затем развит в работе [15]. Чтобы снизить ток лавины RE, в этих работах предлагалось вместо существенного увеличения плотности плазмы инжектировать один или несколько вольфрамовых коллекторов в плазму сразу после стадии вывода тепловой энергии плазмы в результате невынужденного или вынужденного TQ. В работе [15] были рассмотрены разные траектории инжекции нескольких коллекторов в количестве N_c, и расчеты показали, что наиболее эффективна радиальная геометрия инжекции (рис. 1). Параметры i-го коллектора (i = 1, 2, ..., N_c) помечены нижним индексом i. Цилиндрический вольфрамовый коллектор диаметром d_i, длиной L_i и массой m_i в момент времени t_i относительно начала стадии CQ инжектируется со скоростью v_i со стороны слабого магнитного поля в направлении оси токамака по траектории длиной $L_{tr,i} \cong 1{,}14$ м.

На рис. 1 схематично показаны допустимые отклонения от прямолинейной траектории инжектируемого i-го коллектора $\pm\Delta R_i$, которые должны быть заметно меньше диаметра принимающего отверстия поглотителя коллекторов $2L_a$; кроме того, на схеме показаны области расположения рельсового ускорителя и поглотителя коллекторов.

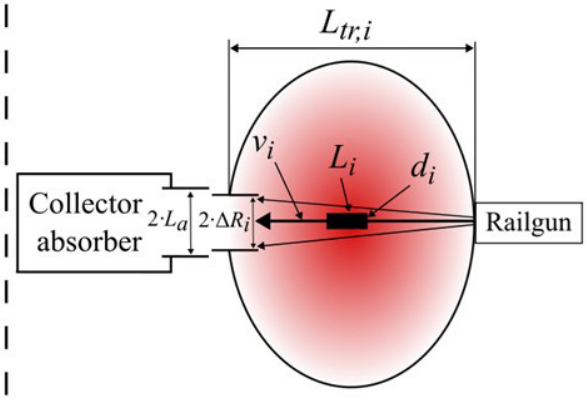


Рис. 1. Схема инжекции коллектора:
Railgun – рельсотрон; d_i, L_i – диаметр и длина коллектора; v_i – скорость инжекции коллектора со стороны слабого магнитного поля в направлении оси токамака по траектории длиной $L_{tr,i}$; ΔR_i – допустимые отклонения от прямолинейной траектории; $2L_a$ – диаметр принимающего отверстия поглотителя коллектора (Collector absorber)

Для надежного применения такого способа, в работе [15] были сформулированы следующие требования к параметрам инжекции коллекторов для установки масштаба ITER.

1. Ток зародышей лавины I_{RE}, согласно выводам работы [10], не должен превышать максимального значения $I_{\max}$ = 0,15 МА для сохранения целостности вакуумной камеры ITER.

2. Отклонения коллекторов ΔR_i от прямолинейной траектории за время пролета плазмы не должны превышать максимального значения $\Delta R_{\max}$ = 1 см, чтобы надежно собирать коллекторы в достаточно компактном устройстве поглотителя и не превышать значения размера углового разлета из ускорителя, которое составляет примерно $0{,}001L_{tr,i} \cong 0{,}7$ см [11];

3. Температура коллектора T_i не должна превышать значения $T_{max} \cong 2900$ K (это около 80 % от температуры плавления вольфрама, которая равна 3595 K), чтобы не нарушать целостность коллектора во время его движения по плазме.

Анализ изменения первого требования для выбора параметров коллекторов при переходе от ITER к TRT, вообще говоря, представляет нетривиальную задачу. Если предположить, что опасность нарушения целостности вакуумной камеры установки зависит от количества энергии, оставшейся в пучке RE на стадии плато (это для ITER с током плазмы до срыва $I_p = 15$ MA соответствует $I_{max}/I_p = 0{,}15\text{MA}/15\text{MA} = 0{,}01$), то можно оценить максимальное значение тока для TRT: $I_{max} = 0{,}01I_p = 50$ кА. Для радиальной инжекции коллектора на TRT (см. рис. 1) значение $\Delta R_{max} \cong 0{,}001L_{tr,i} \cong 1{,}2$ мм. Требование же к температуре $3T_{max} \cong 2900$ K остается прежним.

В заключение описания элементов DMS и требований, которым она должна отвечать, необходимо подчеркнуть, что в зависимости от количества требуемого вещества аргона и особенно газообразной смеси аргона с дейтерием ($Ar + D_2$) может потребоваться несколько систем инжекции, расположенных при разных тороидальных и/или полоидальных углах, чтобы предотвратить достижение значений температуры плавления поверхностей первой стенки, ближайших к месту инжекции на поверхности первой стенки токамака. Их разогрев возникает вследствие мощного источника излучения, создаваемого при сгорании инжектируемого вещества. Например, для DMS ITER планируется вплоть до 24 таких SPI [6]. Такое большое количество инжекторов требуют как можно более простого и надежного способа инжекции; такой способ мог бы свидетельствовать о преимуществе FMGI над SPI при выборе типа инжекторов.

Выбор времени выключения тока и расчет количества аргона для TRT

Характерное время линейного спада тока при невынужденных (unintended) срывах τ_{CQu} в установке можно оценить с использованием закона подобия $\tau_{CQu}/S > 1{,}7$ мс/м^2 [16]. Оно примерно в 2,3 раза продолжительнее характерного (экспоненциального) времени спада омического тока при условии отсутствия генерации убегающих электронов $\tau_{resu} = L_{pl}/R_{pl}$, определяемого внутренней индуктивностью L_{pl} и сопротивлением R_{pl} плазмы. Для ITER закон подобия дает значение $\tau_{CQu} \cong 35$ мс, что соответствует $\tau_{resu} \cong 15$ мс. При организации вынужденного (intended) срыва с помощью DMS необходимо, чтобы характерное (экспоненциальное) время распада тока $\tau_{resi} = \tau_{CQi}/2{,}3$, которое, согласно работе [8], достигается напуском аргона, попадало в установленный диапазон значений. Нижний предел этого диапазона задан вихревыми токами, а верхний – токами гало [6]. Для ITER эти пределы оценены в работах [8, 9] и составляют $\tau_{CQi} \cong (22 - 66)\cdot 2{,}3$ мс, что соответствует временному диапазону $\tau_{resi} \cong 22 - 66$ мс [8, 9]. В соответствии с законом подобия, принятым в работе [16], для TRT значение этого времени $\tau_{CQu} = 3$ мс. По аналогии с ITER можно ожидать, что диапазон резистивных экспоненциальных времен спада тока в TRT составляет

$$\tau_{resi} \cong (22 - 66)\cdot(3/35) = (1{,}9 - 5{,}7) \text{ мс}.$$

В дальнейших расчетах будем рассматривать промежуточный случай вынужденного срыва плазмы со значением $\tau_{resi} = 3$ мс из диапазона, указанного выше. Для определенности далее характерное (экспоненциальное) время спада тока записывается как $\tau_{resi} \equiv \tau_{CQ}$ (при этом подчеркивается тот факт, что параметры рассчитываются для этой стадии срыва).

Предполагается, что быстрое перезамыкание (fast reconnection) магнитной конфигурации на стадии теплового срыва приводит к достаточно равномерному распределению параметров плазмы внутри шнура. Поэтому для простых оценок процесса поглощения RE коллектором использовалось нуль-мерное приближение (как и в работах [11, 17]), где пренебрегается влиянием стенки на развитие токов; это влияние заключается в ограничении проникновения внешней магнитной энергии, переходящей в кинетическую энергию REs. Приближение допустимо, поскольку резистивное время стенки, которое в TRT составляет около 60 мс [4], существенно превышает значение $\tau_{CQ} \cong (1{,}9 - 5{,}7)$ мс. При этом учитывалось (как и в работе [8]), что на стадии TQ происходит небольшое (15%-е) возрастание полного тока до значений $I_{fr} = 1{,}15I_{p0} = 5{,}75$ MA и снижение относительной

внутренней индуктивности до значений $l_{intCQ} = 0{,}7$, характерных для плоского профиля тока плазмы. Эти явления есть следствия быстрого перезамыкания.

Количество частиц аргона, которое необходимо инжектировать для достижения заданного значения характерного времени распада тока $\tau_{CQ} = 3$ мс, мы находили из совместного решения уравнения баланса омического нагрева электронов и уравнения для характерного времени распада тока в начале стадии CQ [8], которые имеют соответственно следующий вид:

$$\eta_{CQ} j_{CQ} = n_{eCQ} n_{Ar} L_{imp}, \tag{1}$$

$$\tau_{CQ} = \frac{L_{intCQ} a^2 k_{el}}{2R\eta_{CQ}}, \tag{2}$$

где j_{CQ} – плотность тока плазмы, $j_{CQ} = I_{fr}/(\pi \cdot a^2 \cdot k_{el})$; η_{CQ} – удельное сопротивление плазмы, зависящее от температуры электронов T_{eCQ} и эффективного заряда плазмы Z_{effCQ} [1]; n_{eCQ} – концентрация электронов, $n_{eCQ} = n_{e0} + n_{Ar}\langle Z_{Ar}\rangle$ ($\langle Z_{Ar}\rangle$ – средний заряд аргона [8]); n_{Ar} – концентрация инжектируемого аргона; L_{imp} – излучательная способность аргона; L_{intCQ} – внутренняя индуктивность, при этом в абсолютных единицах $L_{intCQ} = \mu_0 \cdot R\, l_{intCQ}/2$.

Заметим, что использование уравнения (1) при таком подходе предполагает, что в начале стадии CQ происходит восстановление магнитных поверхностей, разрушенных на стадии TQ.

Модель токов с учетом работы коллекторов и результаты ее применения

Расчеты параметров системы DMS TRT проводились с использованием модели, описанной в работе [15], где ее использовали для оценок параметров коллекторов при работе DMS ITER. Для описания процесса эволюции токов плазмы на стадии CQ использовалась система нуль-мерных уравнений для полного тока плазмы I_p после теплового срыва и для тока убегающих электронов I_{RE}. Эта система имеет следующий вид:

$$\frac{dI_p}{dt} = -\frac{I_p - I_{RE}}{\tau_{CQ}}, \tag{3}$$

$$\frac{dI_{RE}}{dt} = \left(\frac{dI_{RE}}{dt}\right)_{av} - I_{RE} \cdot \sum_{i=1}^{N_c} \frac{1}{\tau_i} \cdot H\left[t - t_i\right] \cdot H\left[\frac{L_{tr,i}}{v_i} + t_i - t\right], \tag{4}$$

где N_c – число инжектированных коллекторов.

Индуктивное электрическое поле E связано с омическим током $I_p - I_{RE}$ и сопротивлением плазмы соотношением

$$E = \frac{\eta_{CQ}\left(I_p - I_{RE}\right)}{\pi k_{el} a^2}, \tag{5}$$

где ток RE следует выражению

$$I_{RE} = ecn_{RE} \cdot \pi \cdot k_{el} \cdot a^2 \tag{6}$$

и определяется плотностью убегающих электронов n_{RE}, формируемой различными механизмами генерации, размножения и потерь.

Уравнение (3) описывает эволюцию вывода полного тока плазмы I_p с характерным временем его распада τ_{CQ}. В уравнении (4) первый член в правой части описывает генерацию тока лавины RE I_{RE} и выражается как [8]:

$$\left(\frac{dI_{RE}}{dt}\right)_{av} = \left(\frac{4\pi\varepsilon_0^2 m_e^2 c^3 \sqrt{\dfrac{3(5+Z_{effCQ})}{\pi}}}{e^4 n_{eCQ}}\right) \cdot I_{RE} \cdot \left(\frac{E}{E_R} - 1\right), \tag{7}$$

где ER – поле Розенблюта, описываемое формулой

$$E_{\mathrm{R}} = \frac{n_{e\mathrm{CQ}} e^3 \ln\Lambda_{rel}}{4\pi\varepsilon_0^2 m_e c^2}; \tag{8}$$

при этом e, m_e – заряд и масса покоя электрона, c – скорость света, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума.

В уравнении (4) второй член правой части содержит сумму, формирующую потери убегающих электронов каждым i-м вольфрамовым коллектором, движущимся через плазму. Подразумевается, что коллекторы запускаются по одинаковой траектории в экваториальном сечении токамака, при разных тороидальных углах. При этом $\tau_i = V/(c \cdot d_i \cdot L_i)$ – характерное время сбора RE. Время влета коллектора t_i в плазму можно варьировать относительно начала стадии CQ и учитывать с помощью функции Хевисайда $H(t - t_i)$. Время нахождения коллектора в CQ-плазме также учитывается с помощью функции Хевисайда $H[(L_{tr,i}/v_i) + t_i - t)]$. В уравнении (4) суммированием по индексу i учтено воздействие каждого из N_c коллекторов на сбор RE.

В предположении $E >> E_{\mathrm{R}}$ уравнение (7) можно упростить так же, как в работе [6]:

$$\frac{dI_{\mathrm{RE}}}{dt} = -\frac{l_{int\mathrm{CQ}}}{\sqrt{Z_{eff\mathrm{CQ}} + 5}\ln\Lambda_{rel}} \frac{I_{\mathrm{RE}}}{I_{\mathrm{A}}} \frac{dI_p}{dt} - I_{\mathrm{RE}} \cdot \sum_{i=1}^{N_c} \frac{1}{\tau_i} \cdot H\left(t - t_i\right) \cdot H\left[\frac{L_{tr,i}}{v_i} + t_i - t\right], \tag{9}$$

где I_{A} – ток Альфвена, $I_{\mathrm{A}} = \dfrac{4\pi m_e c}{e\mu_0} \cong 17$ кА.

Начальный ток RE оценивался с помощью уравнения (6) в предположении, что он формируется во время стадии TQ с характерным временем спада температуры t_0, по механизму «горячего хвоста» (hot-tail) на основе рекомендаций в работах [8, 18]. Для нахождения концентрации зародышей RE n_{RE0} использовался упрощенный вариант решения уравнения Фоккера – Планка:

$$n_{\mathrm{RE0}} = n_{e0} \frac{2}{\sqrt{\delta}} u_{c,\min} e^{-(u_{c,\min})^2}, \tag{10}$$

причем $u_{c,\min}$ следует выражению

$$u_{c,\min} = \left\{ \frac{4}{3} t_0 \nu_0 \left[1 + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{E_{D0}}{2E_0} \right) - \ln\left(\frac{4}{3} t_0 \nu_0 \right) \right] - 3 t_0 \nu_0 \right\}^{\frac{1}{3}}, \tag{11}$$

где E_0, E_{D0} – индукционное электрическое поле перед тепловым срывом и электрическое поле Драйсера, соответственно; ν_0 – частота электрон-электронных столкновений до срыва;

$$E_{\mathrm{D0}} = \frac{n_{e0} e^3 \ln\Lambda_{rel}}{4\pi\varepsilon_0^2 T_{e0}}; \nu_0 = \frac{n_{e0} e^4 \ln\Lambda}{4\pi\varepsilon_0^2 m_e^{\frac{1}{2}} (2T_{e0})^{\frac{3}{2}}};$$

здесь $\ln\Lambda$, $\ln\Lambda_{rel}$ – кулоновские логарифмы для тепловых и убегающих электронов.

В рамках нуль-мерного подхода плотность и температура электронов полагались $n_{e0} = \langle n_e \rangle$ и $T_{e0} = \langle T_e \rangle$.

Таким образом, методом Рунге – Кутта 4-го порядка совместно решались уравнения (3) для тока плазмы I_p и (9) для тока лавины убегающих электронов I_{RE}. При этом предполагались неизменными во времени следующие параметры задачи:

$$\eta_{\mathrm{CQ}}, T_{e\mathrm{CQ}}, Z_{eff\mathrm{CQ}}, n_{e\mathrm{CQ}}, L_{int\mathrm{CQ}}.$$

Для тока плазмы задавалось начальное условие $I_p(0) = I_{fr}$. Начальное условие $I_{\mathrm{RE}}(0) = I_{\mathrm{RE0}}$ для тока зародышей лавины убегающих электронов определялось из уравнения (6) с величиной n_{RE0}, рассчитанной с помощью уравнений (10) и (11).

Возможная продолжительность стадии TQ для TRT $t_0 = 0{,}03 – 0{,}30$ мс была определена в соответствии с результатами работ [19, 20] (рис. 2). Эксперименты на установке JET [20] демонстрировали существенные отклонения от данного скейлинга при измерениях с применением диагностик ECE (Electron Cyclotron Emission), которые способны измерять сигнал с разным шагом по времени от $\Delta t = 4$ мкс до $\Delta t = 400$ мкс (см. рис. 2, *а*).

Результаты измерения величины t_0 сопоставляются с ее зависимостью от малого радиуса установки (см. рис. 2, *b*).

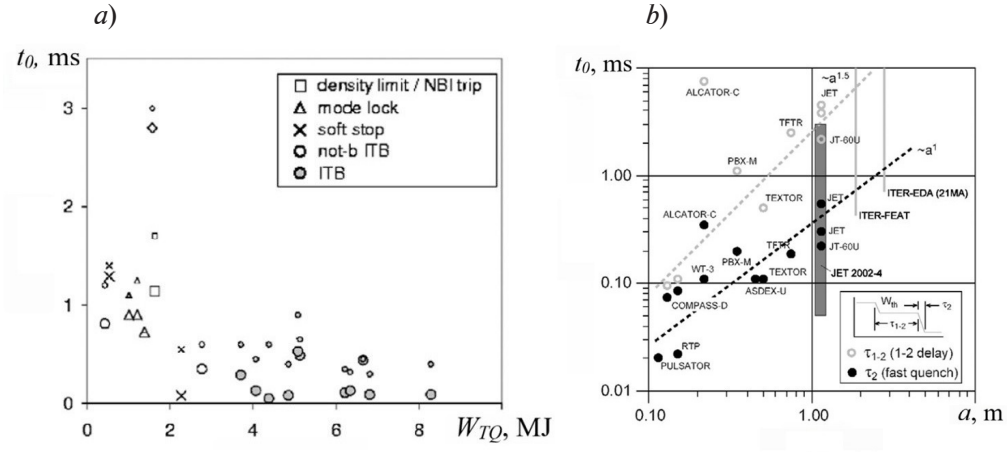


Рис. 2 [19]. Сопоставление результатов измерения характерных времен стадии TQ на установке JET:

a – характерная продолжительность t_0 теплового срыва в зависимости от энергии плазмы до срыва W_{TQ} согласно ECE с разным временным разрешением – 400 и 4 мкс (мелкие и крупные кружки соответственно); *b* – зависимости t_0 от малого радиуса установки *a*

Из результатов работы [20] следует, что скейлинг, использованный в работе [19], достоверен для омического режима работы токамака. Анализ данных на рис. 2 показывает, что с ростом мощности нагрева плазмы и энергии плазмы W_{TQ}, к началу стадии TQ продолжительность t_0 падает, а также наблюдается заметный разброс экспериментальных данных. Для случая JET с малым радиусом (0,9 м) значение времени $t_0 \cong 0{,}5$ мс получено из закона подобия (см. рис. 2, *b*), выражающего пропорциональность характерного времени вывода тепловой энергии t_0 малому радиусу установки *a*; оно характеризуется значительным разбросом 0,5 – 3,0 мс относительно этого значения (см. рис. 2, *b*). Исходя из закона подобия, для TRT с малым радиусом 0,57 м можно оценить значение времени t_0:

$$t_0 = 0{,}5 \text{ мс} \cdot (0{,}57 \text{ м}/0{,}90 \text{ м}) \cong 0{,}3 \text{ мс}.$$

Из-за имеющейся неопределенности при расчетах учитывается, что на установке TRT будет происходить дополнительный нагрев, энергия плазмы перед началом стадии TQ будет существенно выше энергии в омическом режиме, и, как следствие, значение t_0 может снижаться вплоть до порядка величины (см. рис. 2). Исходя из того, что выбранные времена t_0 для TRT соответствуют стадии быстрого падения температуры с временем τ_2 (см. рис. 2, *b*), в качестве начальной температуры, используемой при расчете концентрации зародышей убегающих электронов, бралась средняя температура по шнуру перед началом теплового срыва $\langle T_e \rangle = 10$ кэВ, соответствующая сценарию, оптимизированному для получения максимальных потоков нейтронов и доли неиндукционного тока по плазме. Такой выбор основан на том, что более горячая плазма гораздо опаснее в плане ее безаварийного выключения с помощью системы DMS.

В случае сценария № 1 с предсказанием начала срыва, для оценки мощности переизлучения тепловой энергии плазмы и получения характерного времени распада тока $\tau_{CQ} = 3$ мс учитывался напуск аргона во время запуска DMS. Значение $\tau_{CQ} = 3$ мс, в соответствии с уравнениями (1) и (2), определяет плотность инжектированного аргона как $n_{Ar} \cong 4{,}1 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$. При такой плотности аргона плотность электронов $n_{eCQ} \cong 2{,}5 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$, температура плазмы $T_{eCQ} \cong 8{,}1$ эВ и эффективный заряд $Z_{effCQ} \cong 2{,}15$.

Таким образом, при моделировании в качестве начальных использовались следующие значения:

$$I_{fr} = 5{,}75 \text{ МА}, \; l_{intCQ} = 0{,}7, \; \ln\Lambda_{rel}\,\Lambda \cong 21.$$

Если учитывать приведенные значения параметров и значение величины n_{RE0}, которая

была рассчитана с помощью уравнений (10) и (11), то, согласно уравнению (6), начальное значение тока зародышей убегающих электронов составляет $I_{RE0} \cong 77$ кА для величины $t_0 = 0{,}3$ мс.

Для учета изменений траектории коллектора и его нагрева были приняты во внимание эффекты, связанные с взаимодействием между коллектором и RE, что подробно описано для DMS ITER в работе [15].

Результаты моделирования параметров коллекторов, отвечающих трем требованиям (см. выше), представлены в табл. 1 для четырех вариантов (№ 1 – № 4), которые различаются количеством коллекторов N_c и иногда разными значениями параметров. Температура коллектора T_i была нормирована на величину T_{max}, отклонение ΔR_i нормировано на величину R_{max} и значение моделируемого I_{RE} тока лавины через 150 мс с момента начала моделирования нормировано на величину I_{max}. Эволюции тока плазмы и тока лавины RE для сценария № 1 без инжекции и сценариев № 2 и № 4 с инжекцией 1-го и 3-х коллекторов без задержки в момент $t_i = 0$ мс показаны на рис. 3 соответственно.

Таблица 1

Результаты расчетов параметров коллекторов для вариантов с радиальной инжекцией при $\tau_{CQ} = 3$ мс и $t_0 = 0{,}3$ мс

№	N_c	t_i, мс	d_i, мм	L_i, мм	m_i, г	T_i/T_{max}	$\Delta R_i/\Delta R_{max}$	I_{RA}/I_{max}
1	–							39,6
2	1	0,0	8	80	78	0,93	0,33	$6{,}9\cdot10^{-7}$
3	2					0,38	0,14	0,0
4	3		6	60	33	0,53	0,11	$9{,}9\cdot10^{-13}$
5	2					0,95	0,31	$5{,}7\cdot10^{-8}$
6	3	0,1				0,99	0,43	$9{,}9\cdot10^{-13}$
7	3	0,2				1,41	0,91	$9{,}9\cdot10^{-13}$

Примечания. 1. Вариант № 1 не предполагает наличия инжекции. 2. Для вариантов № 2 – № 7 значение скорости инжекции коллектора одинаково: $v_i = 450$ м/с.

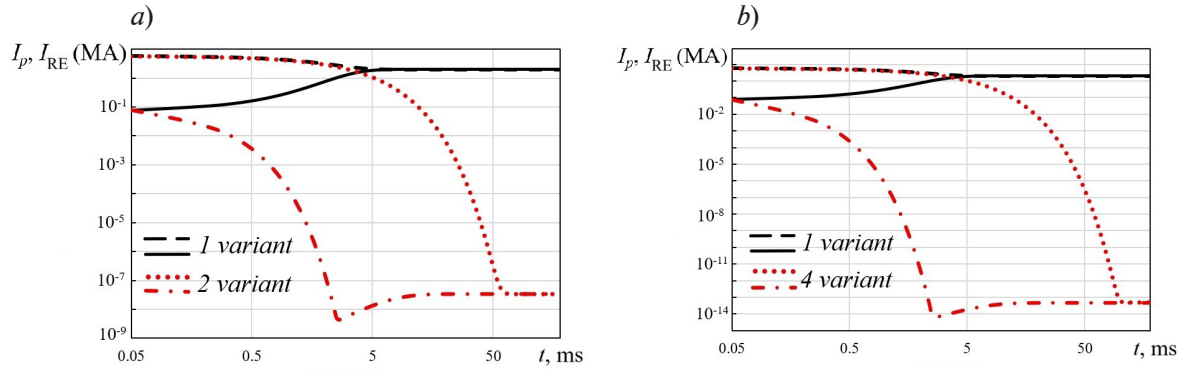


Рис. 3. Эволюции полного тока I_p и тока лавины I_{RE} сразу после стадии TQ (с момента $t_i = 0$ мс): *a* – для вариантов № 1 и № 2; *b* – для № 1 и № 4. Кривые I_p показаны штриховыми либо точечными линиями, I_{RE} – сплошными либо штрихпунктирными линиями (см. табл. 1, $\tau_{CQ} = 3$ мс и $t_0 = 0{,}3$ мс)

Чтобы снизить ток RE и удовлетворить сформулированным требованиям, были рассмотрены разные сценарии инжекции. Как следует из данных для варианта № 2 (см. табл. 1), решение поставленной задачи можно получить и при инжекции одного коллектора достаточно большой массы. Однако при увеличении этой массы усложняется обеспечение ускорения коллектора. В случае аварийного отказа системы инжекции

коллектора ток убегающих электронов может привести к нарушению целостности установки. В связи с этим были рассмотрены сценарии с инжекцией двух коллекторов той же массы $m_i \cong 78$ г (см. вариант № 3, табл. 1) и трех коллекторов с массой $m_i \cong 33$ г, т. е. сниженной более, чем вдвое (см. вариант № 4, табл. 1). Заметим, что такое снижение массы (и, соответственно, поперечного размера до 5 мм) допустимо с точки зрения поглощения RE [11] с максимально ожидаемыми энергиями ≅ 20 МэВ [6, 8].

Видно, что параметры инжекции в вариантах № 3 и № 4 удовлетворяют всем сформулированным требованиям и основная проблема – это нагрев коллекторов, который ограничивает как их размеры, так и их скорости.

Варианты № 5 – № 7 в табл. 1 соответствуют результатам моделирования еще трех вариантов, учитывающих аварийные ситуации. Вариант № 5 с инжекцией двух коллекторов на случай отказа одной из трех систем инжекции. Видно, что сформулированные требования выполняются, но значения параметров находятся вблизи их пороговых значений.

Максимально возможная задержка времени t_i инжекции коллектора была оценена с помощью моделирования при $t_i = 0{,}1$ и 0,2 мс для вариантов № 6 и № 7 соответственно. Эволюция тока плазмы и тока RE для вариантов № 1, № 6 и № 7 для радиальной инжекции представлена на рис. 4.

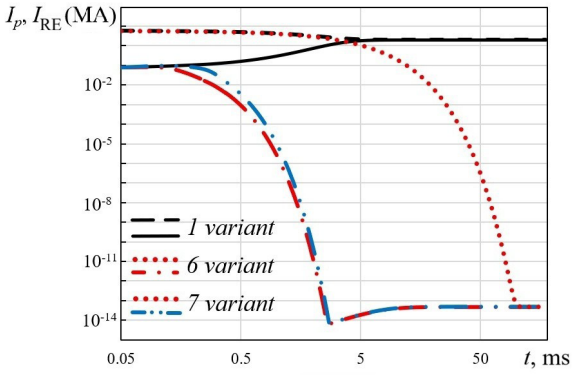


Рис. 4. Эволюции полного тока и тока лавины при $\tau_{CQ} = 3$ мс и $t_0 = 0{,}1$ мс для сравнения вариантов № 1, № 6, № 7 с разной задержкой инжекции коллекторов (см. табл. 1)

Кривые I_p показаны штриховыми либо точечными линиями, I_{RE} – сплошными либо штрихпунктирными линиями, либо пунктирными с двумя штрихами

Анализ результатов для вариантов № 6 и № 7 показывает, что при задержке инжекции коллекторов количество RE значительно возрастает, что может привести как к отклонению от допустимой траектории инжекции, так и к повышению температуры коллекторов. В варианте № 6 параметры коллекторов сопоставимы с максимальными значениями, но становятся неприемлемо высокими в варианте № 7.

Для случая, когда предсказания срыва нет, было проведено моделирование для сценария № 2 запуска DMS после наступления невынужденного TQ. В момент зарегистрированного существенного падения тепловой энергии плазмы в результате невынужденного TQ выполняется инжекция трех коллекторов. Предполагается, что во время невынужденного срыва тепловая энергия плазмы при выходе на стенку приведет к попаданию в плазму примеси и росту ее плотности приблизительно на 30% ($n_{eCQ} \cong 1{,}33 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$), при этом характерное время распада тока составит $\tau_{CQ} = 5{,}3$ мс. Чтобы подавить ток лавины убегающих электронов при таком сценарии, необходимо существенно расширить размеры коллектора, так как начальный ток RE составит $I_{RE0} \cong 4{,}69$ МА для $t_0 = 0{,}3$ мс. Необходимо при рассмотрении запуска трех коллекторов выполнить условие соблюдения критериев для случая отказа одной из систем инжекции. В табл. 2 приведены всевозможные рассмотренные сценарии инжекции с невынужденным срывом для разных ситуаций.

Анализ данных табл. 2 приводит к заключению, что проблема с нагревом усугубляется, по сравнению со сценарием, где срыв успешно предсказывается. Целостность коллекторов удается сохранить только при условии, когда масса увеличивается почти в 4 раза. При этом расчеты показывают, что задержка инжекции практически невозможна, так как при $t_i = 0{,}1$ мс значения температуры уже превышают критерии $T_i/T_{max} = 1{,}15$. Несмотря на возможные трудности с ускорением коллекторов массами 0,23 кг, возможность подавлять ток лавины в сценарии с невынужденным срывом выступает преимуществом данного способа.

Как и в работе [15], моделирование показывает, что со стороны энергии и компактности рельсотрона, для получения требуемых скоростей инжекции вариант с радиальной

Таблица 2

Результаты расчетов параметров коллекторов для сценариев инжекции с невынужденным срывом при τ_{CQ} = 5,3 мс и t_0 = 0,3 мс

№	N_c	Вариант невынужденного срыва	T_i/T_{max}	$\Delta R_i/\Delta R_{max}$	I_{RE}/I_{max}
1	0	Срыв без инжекции коллекторов	–		111,2
2	3	Инжекция 3 коллекторов	0,75	0,27	0
3	2	Невылет одного из 3 коллекторов	0,94	0,34	
4	3	Задержка инжекции t_i = 0,1 мс	0,87	1,15	
Все коллекторы: d_i = 11,5мм, L_i = 115 мм, m_i = 0,23 кг, v_i = 450 м/с					

Обозначения: N_c – количество коллекторов; d_i, L_i, m_i – диаметр, длина и масса коллектора; v_i – скорость инжекции коллектора; T_i/T_{max} – температура коллектора; $\Delta R_i/\Delta R_{max}$ – его отклонение от траектории; I_{RE}/I_{max} – ток лавины убегающих электронов (все три величины нормализованы)

инжекцией представляется наиболее приемлемым. Поэтому и для установки TRT, тороидальное сечение вакуумной камеры которого показано на рис. 5, именно в такой геометрии схематично изображены элементы DMS. Если данный вариант трудно осуществим, то стоит рассмотреть варианты с вертикальной и тангенциальной инжекциями. Помимо этого, на рис. 5 представлен инжектор разрушенных макрочастиц (SPI 1) [10] и подвижный газовый клапан (FMGI 2) [14].

Была сделана оценка нагрева и отклонения коллектора от траектории при его взаимодействии с пучком энергичных нейтральных атомов NBI (neutral beam injection) нагрева. Мощность пучка P_{NBI} = 5 МВт, энергия пучка нейтральных атомов E_{NBI} = 500 кэВ, радиус пучка R_{NBI} = 0,15 – 0,20 м. Для радиальной инжекции со скоростью коллектора v_i = 450 м/с и размерами d_i = 6 мм, L_i = 60 мм температура после взаимодействия с пучком повысится на $T_i/T_{max} = 8\cdot10^{-4}$, а отклонение составит $\Delta R_i/\Delta R_{max} = 5\cdot10^{-5}$. Оценки показывают, что влиянием атомов NBI на поведение инжектированного коллектора можно пренебречь.

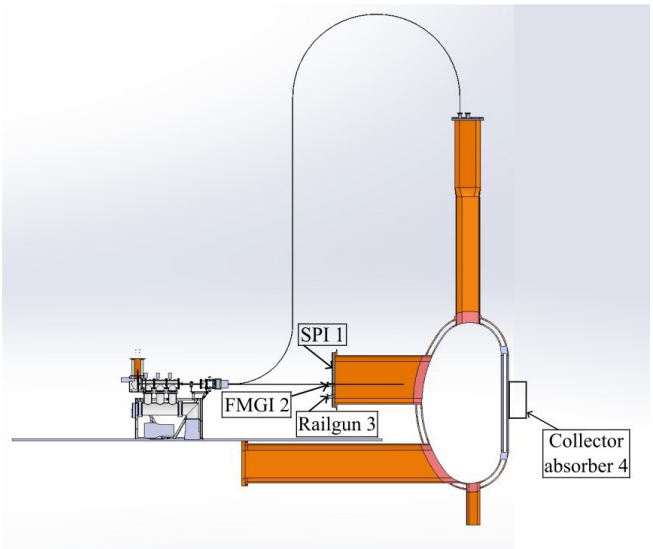


Рис. 5. Полоидальное сечение токамака TRT с элементами аппаратуры DMS:
1 – инжекция разрушенных макрочастиц для быстрой инжекции аргона и дейтерия (SPI – Shattered Pellet Injection); 2 – подвижный газовый клапан для быстрой массивной инжекция газа (FMGI – Fast Massive Gas Injection); 3 – рельсотрон (Railgun); 4 – ловушка коллекторов (Collector absorber)

Был рассчитан вариант решения проблемы тока лавины RE с помощью напуска рабочего газа. Результаты этого расчета представлены на рис. 6. Видно, что при плотности дейтерия D_2, равной около $1{,}5\cdot10^{20}$ м$^{-3}$, удается снизить величину I_{RE} до требуемых значений. При этом плотность инжектированного аргона $n_{Ar} \cong 2{,}4\cdot10^{19}$ м$^{-3}$, плотность электронов $n_{eCQ} \cong 3{,}9\cdot10^{20}$ м$^{-3}$, температура плазмы $T_{eCQ} \cong 7{,}7$ эВ и эффективный заряд $Z_{effCQ} \cong 1{,}44$.

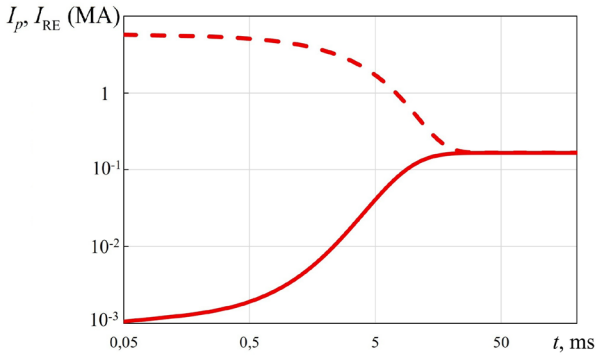


Рис. 6. Эволюции полного тока I_p и тока лавины I_{RE} при τ_{CQ} = 3 мс и t_0 = 0,3 мс и инжекции дейтерия D_2 с момента сразу после TQ (t_i = 0 мс). Кривая I_p показана штриховой линией, I_{RE} – сплошной линией

Следует, однако, учитывать неопределенность в значениях характерного времени TQ t_0, которая обсуждается в работе [20] и хорошо видна на рис. 2, *b*. Поэтому расчет был выполнен с значением t_0 = 0,03 мс. Результаты показали, что для сохранения значений начального тока RE и его эволюции (см. рис. 6) потребуется увеличение плотности инжектируемого рабочего газа (дейтерия D_2) более чем на порядок ($\cong 3{,}5\cdot10^{21}$ м$^{-3}$). Такое увеличение плотности приведет к повышению нагрузок на технологические системы установки, например на систему откачки, что должно учитываться при проектировании и конструировании установки TRT.

Из-за возможных ошибок при определении момента невынужденного срыва, представляется целесообразным разработать комбинированную систему DMS, которая бы запускала инжекцию аргона и дейтерия в сценарии срыва № 1 по раннему сигналу наступления невынужденного срыва, а также запуск инжекции аргона и массивных (230 г) коллекторов по сценарию срыва № 2 после невынужденного TQ-срыва.

Заключение

Исходя из требований, налагаемых на безопасный вывод тока плазмы, были промоделированы сценарии инжекции коллекторов. Моделирование показало, что наиболее эффективен сценарий DMS с одновременной радиальной инжекцией трех коллекторов массой 33 г (каждый) и скоростью 450 м/с, развиваемой в момент сразу после TQ. Для этой геометрии моделируемые значения составили

$$I_{RE}/I_{max} = 9{,}9\cdot10^{-13},\ \Delta R_i/\Delta R_{max} = 0{,}11 \text{ и } T_i/T_{max} = 0{,}53,$$

и они обеспечат безопасное завершение разряда.

Даже в случае аварийной ситуации, если один из трех коллекторов не будет инжектирован, все требования по безопасному завершению разряда по-прежнему выполнятся:

$$I_{RE}/I_{max} = 5{,}7\cdot10^{-8},\ \Delta R_i/\Delta R_{max} = 0{,}31 \text{ и } T_i/T_{max} = 0{,}95.$$

Возможна задержка запуска коллекторов относительно момента начала TQ, но не более, чем на 0,1 мс.

Показано, что в случае ошибки в системе предсказаний DMS и наступлении невынужденного TQ запуск коллекторов системы DMS также решит проблему подавления токов RE, но при этом требуется заметное увеличение массы (с 33 г до 230 г). Поэтому предлагается разрабатывать комбинированную систему DMS, которая бы запускала инжекцию аргона и дейтерия по сценарию срыва № 1 по раннему сигналу наступления невынужденного срыва и выполняла запуск инжекции аргона и трех массивных (230 г) коллекторов по сценарию срыва № 2 после невынужденного TQ-срыва. Использование такого подхода позволит избежать проблем при ложных предсказаниях DMS, ведущих к инжекции коллекторов в еще горячую плазму. Такое предсказание приведет к их плавлению и существенному отклонению от первоначальной траектории. Детектирование срыва и падения температуры по сигналу от диагностик имеет 100%-ю надежность и исключает такой сценарий.

Оценены плотности дейтерия D_2: $n_{D_2} \cong (1{,}5 - 35)\cdot 10^{20}$ м$^{-3}$, которые следует достигать при инжекции с целью подавления генерации токов RE столкновительным механизмом. Отметим, что такой вариант анализировался при условии успешного предсказания начала невынужденного TQ-срыва. Возможность достижения таких плотностей после наступления указанного срыва, как отмечалось выше, пока еще не исследовалась и требует дальнейшего рассмотрения. Подчеркнем, что вариант инжекции коллекторов решает проблемы RE при любом сценарии.

В заключение перечислим основные предполагаемые дальнейшие шаги для моделирования системы DMS:

одномерное моделирование;

учет свободных и свободносвязанных электронов;

учет влияния процессов вертикального смещения плазмы (*англ.* Vertical Displacement Event (VDE)) на работу DMS, которое потребует привлечения кодов типа ДИНА, позволяющих моделировать переходные процессы, включая срывы и VDE. Подобные коды способны рассчитывать эволюцию равновесия плазмы, спады плазменного тока и сопутствующие гало-токи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Wesson J., Campbell D. J.** Tokamaks. 4-th ed. (International series of monographs on physics, Vol. 149). Oxford, New York: Oxford University Press, 2011. 812 p.

2. **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.

3. **Леонов В. М., Коновалов С. В., Жоголев В. Е., Кавин А. А., Красильников А. В., Куянов А. Ю., Лукаш В. Э., Минеев А. Б., Хайрутдинов Р. Р.** Сценарии разряда токамака с реакторными технологиями // Физика плазмы. 2021. Т. 47. № 11. С. 986–997.

4. **Хайрутдинов Р. Р., Лукаш В. Э., Пустовитов В. Д.** Анализ электромагнитных нагрузок на вакуумную камеру при тепловом срыве в токамаке TRT // Физика плазмы. 2021. Т. 47. № 11. С. 1007–1015.

5. **Baylor L. R., Barbier C. C., Carmichael J. R., et al.** Disruption mitigation system developments and design for ITER // Fusion Science and Technology. 2015. Vol. 68. No. 2. Pp. 211–215.

6. **Breizman B. N., Aleynikov P., Hollmann E. M., Lehnen M.** Physics of runaway electrons in tokamaks // Nuclear Fusion. 2019. Vol. 59. No. 8. P. 083001.

7. **Rea C., Montes K. J., Erickson K. G., Granetz1 R. S., Tinguely R. A.** A real-time machine learning-based disruption predictor in DIII-D // Nuclear Fusion. 2019. Vol. 59. No. 9. P. 096016.

8. **Martín-Solís J. R., Loarte A., Lehnen M.** Formation and termination of runaway beams in ITER disruptions // Nuclear Fusion. 2017. Vol. 57. No. 6. P. 066025.

9. **Putvinski S., Fujisawa N., Post D., Putvinskaya N., Rosenbluth M. N., Wesley J.** Impurity fueling to terminate tokamak discharges // Journal of Nuclear Materials. 1997. Vol. 241–243. 11 February. Pp. 316–321.

10. **Vallhagen O., Hanebring L., Artola F. J., Lehnen M., Nardon E., Fülöp T., Hoppe M., Newton S. L., Pusztai I.** Runaway electron dynamics in ITER disruptions with shattered pellet injections // Nuclear Fusion. 2024. Vol. 64. No. 8. P. 086033.

11. **Sergeev V. Y., Kuteev B. V.** Disruption mitigation in tokamak reactor via reducing the seed electrons of avalanche // Nuclear Fusion. 2021. Vol. 61. No. 8. P. 086021.

12. **Hutchinson I. H.** Principles of plasma diagnostics // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2002. Vol. 44. No. 12. Pp. 2603–2603.

13. **Gebhart T. E., Baylor L. R., Meitner S. J.** Experimental pellet shatter thresholds and analysis of shatter tube ejecta for disruption mitigation cryogenic pellets // IEEE Transactions on Plasma Science. 2019. Vol. 48. No. 6. Pp. 1598–1605.

14. **Дрёмин 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.

15. **Kuteev B. V., Bashkatov S. O., Sergeev V. Yu.** The impact of a flying collector on runaway electrons during current disruption in a tokamak // Proceedings of the 30th IAEA Fusion Energy Conference (IAEA CN-234), 13–18 October, 2025. Tianfu International Convention Center, Chengdu, China. TH/7-1.

16. **Wesley J. C., de Vries P. C., Eidietis N. W., et al.** Disruption, halo current and rapid shutdown database activities for ITER // Proceedings of the 23rd IAEA Fusion Energy Conference. October 10–16, 2010. Daejon, Republic of Korea 2010. Pp. 1–8.

17. **Martín-Solís J. R., Loarte A., Lehnen M.** On the avalanche generation of runaway electrons during tokamak disruptions // Physics of Plasmas. 2015. Vol. 22. No. 8. P. 082503.

18. **Smith H. M., Verwichte E.** Hot tail runaway electron generation in tokamak disruptions // Physics of Plasmas. 2008. Vol. 15. No. 7. P. 072502.

19. **ITER Physics Basis Editors, ITER Physics Expert Group Chairs, Co-Chairs ITER Joint Central Team, Physics Integration Unit.** ITER physics basis editors // Nuclear Fusion. 1999. Vol. 39. No. 12. P. 2237.

20. **Riccardo V., Loarte A., the JET EFDA Contributors.** Timescale and magnitude of plasma thermal energy loss before and during disruptions in JET// Nuclear Fusion. 2005. Vol. 45. No. 11. P. 1427.

REFERENCES

1. **Wesson J., Campbell D. J.,** Tokamaks, 4-th ed. (International series of monographs on physics, Vol. 149), Oxford University Press, Oxford, New York, 2011.

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

3. **Leonov V. M., Konovalov S. V., Zhogolev V. E., et al.,** Scenarios of discharge in a tokamak with reactor technologies, Plasma Phys. Rep. 47 (11) (2021) 1107–1118.

4. **Khairutdinov R. R., Lukash V. E., Pustovitov V. D.,** Analysis of electromagnetic loads on the vacuum vessel during thermal quench in the TRT tokamak, Plasma Phys. Rep. 47 (11) (2021) 1128–1136.

5. **Baylor L. R., Barbier C. C., Carmichael J. R., et al.,** Disruption mitigation system developments and design for ITER, Fusion Sci. Technol. 68 (2) (2015) 211–215.

6. **Breizman B. N., Aleynikov P., Hollmann E. M., Lehnen M.,** Physics of runaway electrons in tokamaks, Nucl. Fusion. 59 (8) (2019) 083001.

7. **Rea C., Montes K. J., Erickson K. G., et al.,** A real-time machine learning-based disruption predictor in DIII-D, Nucl. Fusion. 59 (9) (2019) 096016.

8. **Martín-Solís J. R., Loarte A., Lehnen M.,** Formation and termination of runaway beams in ITER disruptions, Nucl. Fusion. 57 (6) (2017) 066025.

9. **Putvinski S., Fujisawa N., Post D., et al.,** Impurity fueling to terminate tokamak discharges, J. Nucl. Mater. 241–243 (11 Febr) (1997) 316–321.

10. **Vallhagen O., Hanebring L., Artola F. J., et al.,** Runaway electron dynamics in ITER disruptions with shattered pellet injections, Nucl. Fusion. 64 (8) (2024) 086033.

11. **Sergeev V. Y., Kuteev B. V.,** Disruption mitigation in tokamak reactor via reducing the seed electrons of avalanche, Nucl. Fusion. 61 (8) (2021) 086021.

12. **Hutchinson I. H.,** Principles of plasma diagnostics, Plasma Phys. Control. Fusion. 44 (12) (2002) 2603–2603.

13. **Gebhart T. E., Baylor L. R., Meitner S. J.,** Experimental pellet shatter thresholds and analysis of shatter tube ejecta for disruption mitigation cryogenic pellets, IEEE Trans. Plasma Sci. 48 (6) (2019) 1598–1605.

14. **Dremin M. M., Kapralov V. G., Kislov A. Ya., et al.,** Vliyaniye napuska blagorodnykh gazov na sryv razryada v tokamake T-10 [The effect of noble gas injection on the discharge disruption in the T-10 tokamak], Issues of Nuclear Science and Technology, Ser.: Thermonuclear Fusion. (4) (2012) 58–70 (in Russian).

15. **Kuteev B. V., Bashkatov S. O., Sergeev V. Yu.,** The impact of a flying collector on runaway electrons during current disruption in a tokamak, Proc. 30th IAEA Fusion Energy Conf. (IAEA CN-234), Oct. 13–18, 2025, Chengdu, China, TH/7-1.

16. **Wesley J. C., de Vries P. C., Eidietis N. W., et al.,** Disruption, halo current and rapid shutdown database activities for ITER, Proc. 23rd IAEA Fusion Energy Conf., Oct. 10–16, 2010. Daejon, Republic of Korea (2010) 1–8.

17. **Martín-Solís J. R., Loarte A., Lehnen M.,** On the avalanche generation of runaway electrons during tokamak disruptions, Phys. Plasmas. 22 (8) (2015) 082503.

18. **Smith H. M., Verwichte E.,** Hot tail runaway electron generation in tokamak disruptions, Phys. Plasmas. 15 (7) (2008) 072502.

19. I**TER Physics Basis Editors, ITER Physics Expert Group Chairs, Co-Chairs ITER Joint Central Team, Physics Integration Unit,** ITER physics basis editors, Nucl. Fusion. 39 (12) (1999) 2237.

20. **Riccardo V., Loarte A., the JET EFDA Contributors,** Timescale and magnitude of plasma thermal energy loss before and during disruptions in JET, Nucl. Fusion. 45 (11) (2005) 1427.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАШКАТОВ Сергей Олегович – *лаборант-исследователь научно-исследовательской лаборатории управляемого термоядерного синтеза Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

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

bashkatov.so@edu.spbstu.ru

СЕРГЕЕВ Владимир Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований, заведующий научно-исследовательской лабораторией управляемого термоядерного синтеза Физико-механического института 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

КАПРАЛОВ Владимир Геннадьевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории управляемого термоядерного синтеза Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

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

vladkap@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-1091-6405

THE AUTHORS

BASHKATOV Sergei O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

bashkatov.so@edu.spbstu.ru

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

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

Статья поступила в редакцию 08.12.2025. Одобрена после рецензирования 01.04.2026. Принята 14.04.2026.
Received 08.12.2025. Approved after reviewing 01.04.2026. Accepted 14.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 51-73, 537.311.5
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19305

АНАЛИЗ ТОЧНОСТИ АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ПОСТОЯННОГО ТОКА В ОГРАНИЧЕННОЙ ОБЛАСТИ

В. В. Филиппов [1, 2] ✉, **А. А. Ершов** [3, 4]

[1] Липецкий государственный технический университет, г. Липецк, Россия;
[2] Липецкий государственный педагогический университет имени П. П. Семенова-Тян-Шанского, г. Липецк, Россия;
[3] Институт математики и механики имени Н. Н. Красовского Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия;
[4] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
✉ wwfilippow@mail.ru

Аннотация. Представленное исследование ставило целью выполнить качественный анализ двух решений краевых задач Неймана для ограниченной области, вычисленных с помощью метода разделения переменных. Предложенные авторские решения моделируют распределение электрического потенциала в проводящей пластине прямоугольной формы, через которую проходит постоянный ток. Рассмотрена модификация стандартных граничных условий, которая состоит в учете неравномерной плотности тока на поверхности контактов. Выполнено сопоставление результатов применения теоретических компьютерных моделей, полученных на основе решений задач Неймана и проведенных экспериментальных измерений. Показано, что вблизи токовых контактов достигается существенное повышение точности решения при использовании модифицированных граничных условий относительно стандартных; при этом в средней области образца расхождение результатов, полученных этими двумя расчетными методами, оказывается минимальным.

Ключевые слова: уравнение Лапласа, задача Неймана, электрический потенциал, квазистационарный электрический ток

Для цитирования: Филиппов В. В., Ершов А. А. Анализ точности аналитических методов расчета электрических полей постоянного тока в ограниченной области // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 52–62. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19305

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19305

AN ANALYSIS OF THE ACCURACY OF ANALYTICAL METHODS FOR CALCULATING THE DC ELECTRIC FIELDS IN A LIMITED AREA

V. V. Filippov [1, 2] ✉, **A. A. Ershov** [3, 4]

[1] Lipetsk State Technical University, Lipetsk, Russia;
[2] Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shansky, Lipetsk, Russia;
[3] Institute of Mathematics and Mechanics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia;

© Филиппов В. В., Ершов А. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

[4] Ural Federal University named after first president of Russia B. N. Yeltsin,
Ekaterinburg, Russia
wwfilippow@mail.ru

Abstract. The presented study aimed to perform a qualitative analysis of two calculated solutions to Neumann boundary value problems for a bounded region using the partition method. The proposed author's solutions have simulated the distribution of electric potential in a rectangular conducting plate through which a direct current passes. A modification of the standard boundary conditions was considered; it involved taking into account the nonuniform current density on the contact surface. A comparison of the results of the application of theoretical computer models obtained on the basis of solutions to the Neumann problems and experimental measurements was carried out. A significant increase in the solution accuracy was shown to achieve near current contacts when using the modified boundary conditions relative to the standard ones. Moreover, the discrepancy between the results obtained by these two calculation methods in the middle region of the sample, turned out to be minimal.

Keywords: Laplace equation, Neumann problem, electric potential, quasi-stationary electric current

For citation: Filippov V. V., Ershov A. A., An analysis of the accuracy of analytical methods for calculating the DC electric fields in a limited area, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 52–62. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19305

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

Введение

Явления электронного переноса в металлах и полупроводниках стали за последнее время одним из основных предметов актуальных исследований в области современной твердотельной электроники и наноэлектроники [1 – 4]. При проектировании компонентной базы электроники важно правильно задавать уравнения переноса и граничные условия [2, 4]. Оптимизация математических моделей, описывающих макроскопические поля и перенос заряда, позволяет совершенствовать методики измерений свойств полупроводниковых кристаллов [5, 6], корректнее определять сопротивление контактов металл-полупроводник [7, 8]. При описании макроскопических эффектов электронного переноса в полупроводниковых материалах и устройствах применяют кинетическое уравнение Больцмана и уравнения Максвелла [9].

На сегодняшний день в литературе [10, 11] описано немалое количество разработок, относящихся к методам решений уравнений Лапласа и Пуассона для ограниченных областей, в том числе применительно к физике полупроводников и полупроводниковой электронике [12, 13].

Аналитические подходы к решению указанных дифференциальных уравнений в частных производных хорошо известны и, как правило, используют методы разделения переменных, функций Грина и конформных отображений. Однако для приложений важны частные решения при соответствующих граничных условиях, соблюдение которых делает зачастую невозможным аналитическое решение поставленных задач. В частности, известные математические трудности вызывает задача решения уравнения Лапласа в случае смешанных условий Дирихле и Неймана на границах геометрической области [14, 15].

В данной работе исследуется решение уравнения Лапласа для потенциала в ограниченной прямоугольной проводящей области. Выполнена экспериментальная проверка двух решений, представленных в литературе.

Математическая постановка задачи и ее решение

Рассчитаем распределение электрического потенциала в области однородного изотропного полупроводника, имеющей форму правильной четырехугольной призмы ($a \times b \times d$), на две грани которой нанесены два низкоомных контакта равного размера.

© Filippov V. V., Ershov A. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Образец такого полупроводника имеет малую толщину d ($d << a, b$), и через металлические контакты *1*, *2* размерами $2c_i \times d$ ($i = 1, 2$), расположенные по периметру образца, проходит постоянный ток I_{12} через всю его толщину (рис. 1).

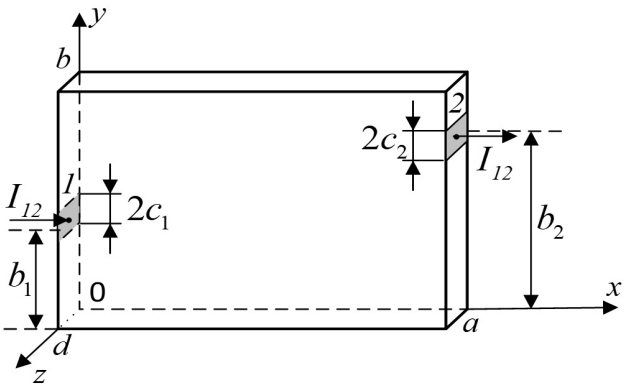


Рис. 1. Схема расположения токовых контактов *1*, *2* на противоположных гранях однородного полупроводникового образца, имеющего форму правильной четырехугольной призмы: I_{12} – постоянный ток через контакты

При условии протекания постоянного электрического тока, в указанной области удобно использовать декартову систему координат, в которой основные уравнения распределения полей имеют следующий вид [16, 17]:

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E},\ \mathbf{E} = -\operatorname{grad}\varphi,\ \operatorname{div}\mathbf{j} = 0, \qquad (1)$$

где $\mathbf{j}$ – плотность тока, $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, φ – потенциал, σ – удельная проводимость полупроводникового материала.

Учитывая условие тонкой пластины ($d << a, b$), мы можем считать распределение потенциала двумерным (далее образец называется прямоугольным). Тогда уравнение для потенциала примет следующий вид:

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} = 0. \qquad (2)$$

Общее решение уравнения (2) находим на основе метода разделения переменных [10, 11], постоянные интегрирования определяются нами в соответствии с задаваемыми граничными условиями. Используя граничные условия для граней $y = 0, b$, известные из литературы [5, 13, 16], имеем:

$$\mathbf{j}_y = \sigma\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{y=0,b} = 0. \qquad (3)$$

Отсюда получаем решение в виде ряда:

$$\varphi(x, y) = \sum_{k=0}^{\infty}\left[A_k \operatorname{ch}(\beta_k x) + B_k \operatorname{sh}(\beta_k x)\right]\cos(\beta_k y), \qquad (4)$$

где A_k, B_k – коэффициенты разложения, $\beta_k = \pi k / b$ ($k \in Z$).

С постановкой граничных условий на гранях $x = 0$ не все так однозначно. Для низкоомных омических контактов необходимо определять смешанные условия, а именно:

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{x=0} = 0,\ y \in \left[0;\ b_1 - c_1\right) \cup \left(b_1 + c_1;\ b\right], \qquad (5)$$

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{x=a} = 0,\ y \in \left[0;\ b_2 - c_2\right) \cup \left(b_2 + c_2;\ b\right], \qquad (6)$$

$$\varphi_{x=0} = \varphi_1,\ y \in \left[b_1 - c_1;\ b_1 + c_1\right], \qquad (7)$$

$$\varphi_{x=a} = \varphi_2,\ y \in \left[b_2 - c_2;\ b_2 + c_2\right]. \qquad (8)$$

Однако на данный момент, для этой задачи в известной нам литературе не представлено решения в элементарных функциях.

В случае малых токовых контактов *1*, *2* ($2c_i < 0{,}1b$) граничные условия можно представить в таком виде:

$$\left.\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right|_{x=0} = \begin{cases} 0, & y \in \left[0;\ b_1 - c_1\right) \cup \left(b_1 + c_1;\ b\right], \\ -\dfrac{I_{12}}{2c_1\, d\, \sigma}, & y \in \left[b_1 - c_1;\ b_1 + c_1\right]; \end{cases} \tag{9}$$

$$\left.\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right|_{x=a} = \begin{cases} 0, & y \in \left[0;\ b_2 - c_2\right) \cup \left(b_2 + c_2;\ b\right], \\ -\dfrac{I_{12}}{2c_2\, d\, \sigma}, & y \in \left[b_2 - c_2;\ b_2 + c_2\right]. \end{cases} \tag{10}$$

Далее, используя известный алгоритм поиска коэффициентов членов ряда Фурье [11, 13], получаем выражение для потенциала в виде ряда аналитических функций:

$$\varphi(x,y) = \frac{I_{12}}{\sigma b d}\left(\frac{a}{2} - x\right) + \frac{2I_{12}}{\sigma \pi d}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{\cos\left(\beta_k y\right)}{k \cdot \mathrm{sh}\left(\beta_k a\right)} \times \right.$$
$$\left. \times \left[\frac{\sin\left(\beta_k c_1\right)}{\beta_k c_1}\mathrm{ch}\left[\beta_k\left(x - a\right)\right] \cdot \cos\left(\beta_k b_1\right) - \frac{\sin\left(\beta_k c_2\right)}{\beta_k c_2}\mathrm{ch}\left(\beta_k\, x\right) \cdot \cos\left(\beta_k b_2\right)\right]\right\}. \tag{11}$$

В большинстве практических случаев, для достижения расчетной погрешности менее 1% достаточно не более 100 членов ряда для расчета потенциала вблизи токовых контактов и порядка 10 в средней области образца.

На практике, как правило, токовые контакты *1* и 2 имеют одинаковый характерный размер ($c_1 = c_2 = c$) и размещены на оси симметрии образца ($b_1 = b_2 = b / 2$). В таком случае формула для распределения электрического потенциала приводится к более простому выражению:

$$\varphi(x,y) = \frac{I_{12}}{bd\sigma}\left(\frac{a}{2} - x\right) + \frac{I_{12}}{bd\sigma}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{\sin\left(2\beta_k c\right)}{2\beta_k c}\frac{\cos\left(2\beta_k y\right)}{k\mathrm{sh}\left(2\beta_k a\right)}\left(-1\right)^k\left[\mathrm{ch}\left(2\beta_k\left(x - a\right)\right) - \mathrm{ch}\left(2\beta_k\, x\right)\right]\right\}. \tag{12}$$

Омическое сопротивление полупроводника R_{12} определяется как разность средних значений потенциалов φ_i под контактами, отнесенная к величине тока I_{12}:

$$R_{12} = \frac{\left\langle \varphi_1 \right\rangle - \left\langle \varphi_2 \right\rangle}{I_{12}},\ \left\langle \varphi_i \right\rangle = \frac{1}{2c_i}\int_{b_i - c_i}^{b_i + c_i}\left[\varphi(y)\right]\Big|_{x=0,a} dy, \tag{13}$$

$$R_{12} = R_0 + r_{12}, \tag{14}$$

$$R_0 = \frac{a}{\sigma b d}, \tag{15}$$

$$r_{12} = \frac{2}{\sigma \pi d}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{1}{k \cdot \mathrm{sh}\left(\beta_k a\right)}\left[\mathrm{ch}\left(\beta_k\, a\right)\left(\left(\frac{\sin\left(\beta_k c_1\right)}{\beta_k c_1}\cos\left(\beta_k b_1\right)\right)^2 + \left(\frac{\sin\left(\beta_k c_2\right)}{\beta_k c_2}\cos\left(\beta_k b_2\right)\right)^2\right) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - 2\frac{\sin\left(\beta_k c_1\right)}{\beta_k c_1}\frac{\sin\left(\beta_k c_2\right)}{\beta_k c_2}\cos\left(\beta_k b_1\right)\cos\left(\beta_k b_2\right)\right]\right\}. \tag{16}$$

Для практически важного случая $b_1 = b_2 = b / 2$, $c_1 = c_2 = c$ выражение (16) допускает существенное упрощение:

$$r_{12} = \frac{2}{\sigma \pi d}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\left(\frac{\sin\left(2\beta_k c\right)}{2\beta_k c}\right)^2 \frac{\mathrm{th}(\beta_k a)}{k}\right\}. \tag{17}$$

В выражениях (14) – (16) R_0 – объемное сопротивление материала, r_{12} – сопротивление растекания, обусловленное неоднородным распределением электрического поля в проводящей области [7, 16].

Полученные выражения (12) – (17) подвергались неоднократной проверке при малых контактах ($2c < 0{,}1b$), при измерениях напряжений между контрольными точками [5, 16].

Однако для контактов большей величины ($0{,}1b < 2c < 0{,}5b$) данные решения имеют значимую погрешность до 8,5 % от разности потенциалов на контактах.

В работах [18, 19] предложено представить граничное условие для граней $x = 0$, a в виде, близком к смешанным условиям Неймана и Дирихле (3), (5) – (8) за счет специального выбора функции для производной потенциала под контактной площадкой. Краевые условия (9), (10), соответственно, заменяются следующими условиями:

$$\left.\frac{\partial \varphi^*}{\partial x}\right|_{x=0} = \begin{cases} 0, & y \in \left[0;\, b_1 - c_1\right) \cup \left(b_1 + c_1;\, b\right], \\ -\dfrac{I_{12}}{\pi \sigma d \sqrt{c_1^2 - \left(y - b_1\right)^2}}, & y \in \left(b_1 - c_1;\, b_1 + c_1\right); \end{cases} \tag{18}$$

$$\left.\frac{\partial \varphi^*}{\partial x}\right|_{x=a} = \begin{cases} 0, & y \in \left[0;\, b_2 - c_2\right) \cup \left(b_2 + c_2;\, b\right], \\ -\dfrac{I_{12}}{\pi \sigma d \sqrt{c_2^2 - \left(y - b_2\right)^2}}, & y \in \left(b_2 - c_2;\, b_2 + c_2\right). \end{cases} \tag{19}$$

Краевые условия (18), (19) рассматриваются в рамках модели, согласно которой форма проводника практически не влияет на форму линий тока (практически не происходит так называемой деформации линий тока, стягивающихся к пятну контакта, так как расстояние до любых других граней велико относительно размеров контакта).

Таким образом, фактически для описания электрического потенциала вблизи малого эквипотенциального контакта (где $\varphi^*(x,y) \approx v(x,y)$) можно использовать следующую краевую задачу в полуплоскости (рис. 2):

$$\begin{cases} \Delta v = 0, & x > 0, \\ v(0, y) = U_1, & y \in [-c, c], \\ \left.\dfrac{\partial v}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, & y \notin [-c, c]. \end{cases} \tag{20}$$

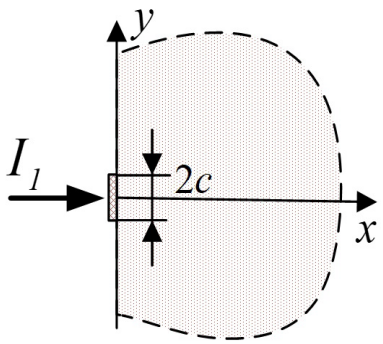


Рис. 2. Схема, поясняющая краевую задачу в полуплоскости (x, y) (см. формулы (20))

Данная задача при заданной силе тока I_1, проходящего через контакт слева направо, имеет единственное точное решение [18]:

$$v(x, y) = U_1 - \frac{I_1}{\pi \sigma d} \ln \left| x + iy + \sqrt{(x + iy)^2 - c^2} \right|, \tag{21}$$

поскольку вблизи контакта $\varphi^*(x, y) \approx v(x, y)$ в качестве эквивалентного условия Неймана можно использовать следующие равенства:

$$\left.\frac{\partial \varphi^*}{\partial x}\right|_{x=0} \approx \left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_{x=0} = -\frac{I_1}{\pi \sigma d \sqrt{c^2 - y^2}}, y \in \left(-c, c\right). \tag{22}$$

Решение уравнения Лапласа для электрического потенциала φ^* с краевыми условиями (3), (18), (19) можно получить численно, если использовать метод разделения переменных, в виде суммы ряда:

$$\varphi^*\left(x, y\right) = \frac{I_{12}}{\sigma b d}\left(\frac{a}{2} - x\right) + \frac{2 I_{12}}{\sigma \pi d} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\cos\left(\beta_k y\right)}{k \cdot \mathrm{sh}\left(\beta_k a\right)} \times \right. \tag{23}$$

$$\left. \times \left[\mathrm{J}_0\left(\beta_k c_1\right) \cdot \mathrm{ch}\left(\beta_k \left(x - a\right)\right) \cdot \cos\left(\beta_k b_1\right) - \mathrm{J}_0\left(\beta_k c_2\right) \cdot \mathrm{ch}\left(\beta_k\, x\right) \cdot \cos\left(\beta_k b_2\right) \right] \right\},$$

где $\mathrm{J}_0(t)$ – функция Бесселя первого рода нулевого порядка.

В практически важном случае для симметричного положения контактов ($b_1 = b_2 = b / 2$) равной величины ($c_1 = c_2 = c$) получаем существенное упрощение выражения для потенциала:

$$\varphi^*(x,y) = \frac{I_{12}}{\sigma b d}\left(\frac{a}{2} - x\right) + \\ + \frac{I_{12}}{\sigma\pi d}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{(-1)^k J_0(2\beta_k c)}{k\cdot \mathrm{sh}(2\beta_k a)}\cdot\left[\mathrm{ch}\left(2\beta_k (x-a)\right) - \mathrm{ch}(2\beta_k x)\right]\cdot\cos(2\beta_k y)\right\}. \quad (24)$$

Соответственно, если использовать выражение (24), то можно получить формулу, выражающую сопротивление образца:

$$R_{12}^* = \frac{\varphi^*(0,b/2) - \varphi^*(a,b/2)}{I_{12}} = \frac{a}{\sigma b d} + \frac{2}{\sigma\pi d}\sum_{k=1}^{\infty} J_0^2(2\beta_k c)\cdot\frac{\mathrm{th}(\beta_k a)}{k}. \quad (25)$$

Для случаев произвольных размеров и положения контактов, на основании решения (23), получаем зависимость сопротивления проводящего образца от параметров σ, a, b, d, b_1, b_2, c_1, c_2 в виде, аналогичном выражению (14), где сопротивление растекания принимает следующий вид:

$$r_{12}^* = \frac{2}{\sigma\pi d}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{1}{k\cdot\mathrm{sh}(\beta_k a)}\left[\mathrm{ch}(\beta_k a)\left(\mathrm{J}_0^2(\beta_k c_1)\cos^2(\beta_k b_1) + \mathrm{J}_0^2(\beta_k c_2)\cos^2(\beta_k b_2)\right) - \right.\right. \\ \left.\left. - 2\cos(\beta_k b_1)\cos(\beta_k b_2)\mathrm{J}_0(\beta_k c_1)\mathrm{J}_0(\beta_k c_2)\right]\right\}. \quad (26)$$

Экспериментальная установка

Проверка полученного расчетного распределения потенциала была проведена на экспериментальной установке, схема которой представлена на рис. 3. Потенциальные контакты *1*, *2* на основе медных проводников были размещены на противоположных гранях электролитической ванны, наполненной проводящей жидкостью (водный солевой раствор) с удельной проводимостью, соответствующей среднему значению диапазона для полупроводниковых материалов (в нашем случае для жидкости $\sigma \approx 10^{-2}$ См/м). Напряжение измерялось вольтметром М890С+ (погрешность не превышала 0,01 В). Погрешность шага измерительного зонда (контакт *4* на рис. 3) определялась с ошибкой, не превышающей 0,5 мм. Источником питания служил генератор низкой частоты Г3-112. Для создания квазистационарного тока использовалась частота 50 Гц. Напряжение между контактами *1*, *2* контролировалось вольтметром и составляло 6 В. Шаг построения эквипотенциалей – 0,5 В. При проведении экспериментального тестирования использовалась электролитическая ванна с размерами a = 30 см, b = 25 см, d = 1 см.

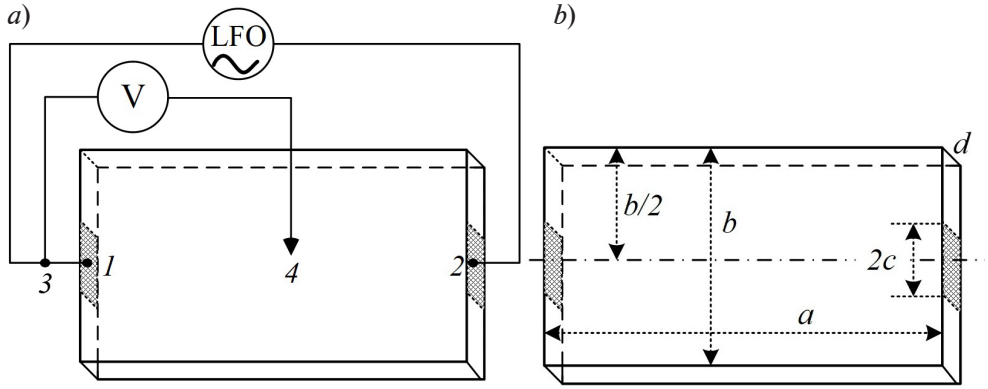


Рис. 3. Принципиальная электрическая схема экспериментальной установки (*a*) и геометрические параметры проводящей области (электролит) и контактов (*b*); LFO – генератор низкой частоты; *1*, *2* – токовые контакты; *3*, *4* – контакты высокоомного вольтметра

При квазистационарных колебаниях, уравнения для распределений электрических полей повторяют уравнения (1) для постоянного тока [17]. В случае периодических квазистационарных колебаний с известной (малой) частотой, разделяют пространственную и временную составляющие токов и напряжений (потенциалов) [11, 17]:

$$\phi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r}) \cdot \varphi_\tau(t) = 0.$$

Соответственно, в области однородной проводящей области, для пространственной части потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ справедливо уравнение Лапласа.

Выполним сравнение амплитудных значений токов проводимости $j = \sigma E$ и токов смещения $j_s = \partial D/\partial t$, где вектор электрического смещения

$$\mathbf{D} = (\varepsilon_1 + i \cdot \varepsilon_2)\varepsilon_0 \mathbf{E}. \tag{27}$$

В формуле (27) ε_1, ε_2 – соответственно действительная и мнимая диэлектрические проницаемости рассматриваемой среды [20].

Принимая для пресной воды значения $\varepsilon_1 = 80$ и $\varepsilon_2 = 5$ [21], при гармонических колебаниях с частотой $f = 50$ Гц, получаем следующее соотношение модулей максимального тока смещения и максимального тока проводимости:

$$\frac{|j_s|_{\max}}{|j|_{\max}} = \frac{2\pi f \cdot \varepsilon_0 \sqrt{\varepsilon_1^{\,2} + \varepsilon_2^{\,2}} \cdot E_{\max}}{\sigma E_{\max}} \approx \frac{5{,}56 \cdot 10^{-11} f \sqrt{\varepsilon_1^{\,2} + \varepsilon_2^{\,2}}}{\sigma} \approx 2{,}2 \cdot 10^{-5}. \tag{28}$$

Для оценки критерия малости области протекания тока, по сравнению с длиной электромагнитной волны, распространяющейся со скоростью $c^* \big/ \sqrt{\varepsilon\mu}$

$$(c^* \approx 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}, \mu \approx 1, \varepsilon_1 \approx \varepsilon >> \varepsilon_2),$$

выполним расчет величины a/λ ($a = 0{,}3$ м):

$$\lambda \approx \frac{1}{f} \frac{c^*}{\sqrt{\varepsilon_1}} \approx 6{,}7 \cdot 10^5 \text{ (м)} \Rightarrow \frac{a}{\lambda} \approx 4{,}5 \cdot 10^{-7}. \tag{29}$$

Таким образом, необходимые условия квазистационарности в рассматриваемом эксперименте выполняются.

Использование постоянных токов в электролитической ванне приводит к явлениям, связанным с выделением составляющих электролита на токовых контактах, что создает дополнительное падение напряжения вблизи электродов *1* и *2* [17].

Использование однородных полупроводниковых кристаллов для экспериментальной проверки сталкивается с рядом технологических затруднений, связанных с изготовлением омических контактов протяженной длины [22 – 24]. Контакт меди с пресной водой известен своей стойкостью к коррозии [25], и в данном случае его можно использовать в качестве модели омического контакта металл-полупроводник.

Результаты компьютерного и экспериментального моделирования

Для экспериментальной проверки приведенных выражений для распределений потенциалов были также построены вычислительные модели в математическом пакете MathCAD [26]. Размеры области и шаг построения эквипотенциальных линий выбирались в соответствии с их экспериментальным определением.

На рис. 4 сопоставлены результаты эксперимента и расчетов при $b_1 = b_2 = b / 2$, $c_1 = c_2 = c$. Экспериментальные точки φ_{exp} эквипотенциалей (синего цвета) в разных случаях контактных площадок достаточно близки к теоретическим моделям потенциалов φ и φ^*, определяемым по формулам (11) и (23). Полученные экспериментальные данные показывают адекватность применяемых теоретических методов расчета.

При значениях токовых контактов $0{,}5 < 2c \le b$ экспериментальная проверка не проводилась, поскольку модель плотности тока под контактом, предложенная в работе [18], не предполагает «больших» токовых контактов, соизмеримых с боковыми гранями. В частности, ряд (23) не переходит в однородное поле при частном случае контактов по площади боковых граней. Однако по мере приближения величины токовых контактов к размеру боковых граней ($2c \to b$) решение в виде (12) вновь становится более точным, поскольку в таком случае это решение приводит к единственно верному однородному распределению потенциала в области образца.

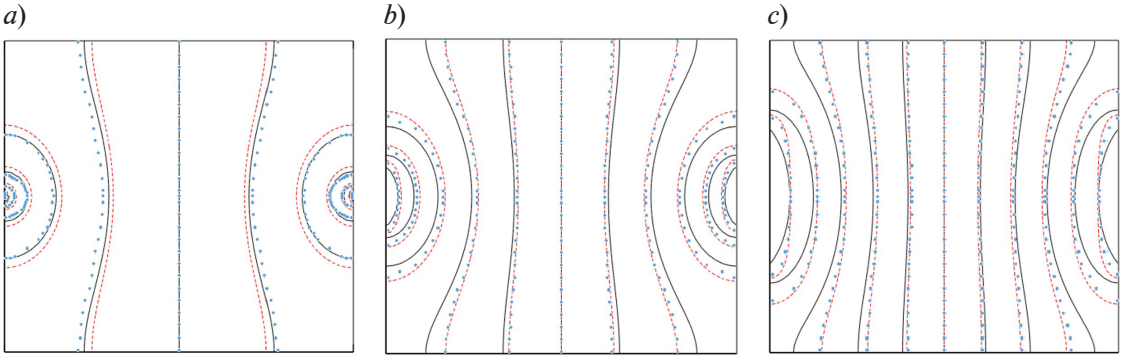


Рис. 4. Сравнение результатов компьютерного моделирования потенциалов φ и φ* (сплошные черные линии и красные пунктиры, соответственно) с данными измерений потенциала φ_{exp} (синие точки) при разных значениях токовых контактов $2c$: $0{,}032b = 8$ мм (*a*), $0{,}20b = 50$ мм (*b*) и $0{,}48b = 120$ мм (*c*)

Заключение

На основе проведенных экспериментов и расчетов можно сделать следующие выводы.

В области токовых контактов наблюдается наибольшая концентрация эквипотенциальных линий и, соответственно, плотности тока. Данная концентрация поля снижается при повышении величины токовых контактов.

Для малых (точечных) контактов наилучшее согласие с экспериментальным распределением достигает решение в виде (12), при нахождении которого плотность тока под контактом была принята постоянной.

При постепенном увеличении контакта в области $0{,}2b < 2c < 0{,}5b$ более точным решением следует считать выражение φ*, определяемое рядом (23).

Наибольшее расхождение применяемых теоретических схем расчетов наблюдается на границах проводника, тогда как на линии, соединяющей центры токовых контактов ($2c \approx 0{,}5b$), расхождения минимальны, и более простой ряд (12) в этом случае практически не требует корректировки даже для достаточно больших контактов.

В работе показано, что использование в контактной области специальной функции вида $A/\sqrt{c^2-(y-b_1)^2}$ (A – некоторая постоянная; c – половина ширины контакта; b_1 и y – координаты центра контакта) для нормальной составляющей градиента потенциала и точки измерения соответственно, позволяет с малой погрешностью, не превысившей в проведенных экспериментах 4,2 % от разности потенциалов на контактах, решать задачу о распределении электрического поля в прямоугольной области с низкоомными токовыми электродами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Touchaei B. J., Shalchian M.** A compact Non-Quasi-Static small-signal model for GaN HEMT // Microelectronics Journal. 2024. Vol. 148. June. P. 106199.

2. **Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А.** Моделирование перспективных приборов наноэлектроники. Ч. I. Модели // Нано- и микросистемная техника. 2025. Т. 27. № 4. С. 167–172.

3. **Raut P., Panda D. K., Goyal A. K.** A comprehensive review on next-generation modeling and optimization for semiconductor devices // IEEE Access. 2025. Vol. 13. 10 July. Pp. 123724–123742.

4. **Zebrev G. I., Malich D. S.** Analytical physics-based modeling of electron channel density in nanosheet and nanowire transistors // IEEE Transactions on Electron Devices. 2023. Vol. 70. No. 4. Pp. 1574–1579.

5. **Заворотний А. А., Ершов А. А., Филиппов В. В., Лузянин С. Е.** Контроль однородности полупроводниковых пленок в процессе проведения зондовых измерений удельной электропроводности // Известия вузов. Физика. 2025. Т. 68. № 2. С. 82–91.

6. **Филиппов В. В., Заворотний А. А., Тигров В. П.** Измерение компонент тензора удельной электропроводности анизотропных полупроводниковых пластин модифицированным методом Ван дер Пау // Известия вузов. Физика. 2019. Т. 62. № 1 (733). С. 92–99.

7. **Андреев А. Н., Растегаева М. Г., Растегаев В. П., Решанов С. А.** К вопросу об учете растекания тока в полупроводнике при измерениях удельного переходного сопротивления омических контактов // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32. № 7. С. 832–838.

8. **Костановский А. В., Зеодинов М. Г., Костановская М. Е.** Удельное электрическое сопротивление нанопорошка карбида кремния // Теплофизика высоких температур. 2025. Т. 63. № 6. С. 770–773.

9. **Зи С.** Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. Пер. с англ. М.: Мир, 1984. 912 с.

10. **Радкевич Е. В., Палин В. В.** Уравнения математической физики. М.: Изд-во «Ленанд», 2024. 297 с.

11. **Полянин А. Д.** Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: Физматлит, 2007. 592 с.

12. **Петров Б. К., Шалимов О. Н.** Новые методы расчета электрических полей и пробивных напряжений *p–n*-переходов в полупроводниковых приборах. Воронеж: Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2008. 213 с.

13. **Филиппов В. В., Лузянин С. Е., Мицук С. В.** Методы решений уравнений Лапласа и Пуассона применительно к электродинамике полупроводников. Липецк: Изд. ЛГПУ им. П. П. Семенова-Тян-Шанского, 2023. 86 с.

14. **Бурский В. П.** Некоторые новые методы исследования краевых задач для общих дифференциальных уравнений в частных производных // Теоретическая и математическая физика. 2024. Т. 218. № 1. С. 48–59.

15. **Алгазин О. Д., Копаев О. В.** Решение смешанной краевой задачи для уравнения Лапласа в многомерном бесконечном слое // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия Естественные науки. 2015. № 1 (58). С. 3–13.

16. **Филиппов В. В.** Особенности явлений электронного переноса в анизотропных полупроводниках. М.: Спутник+, 2015. 257 с.

17. **Матвеев А. Н.** Электричество и магнетизм. СПб: Лань, 2010. 459 с.

18. **Ershov A. A.** Asymptotics of the solution of Laplace's equation with mixed boundary conditions // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2011. Vol. 51. No. 6. Pp. 994–1010.

19. **Дмитриев А. В., Ершов А. А.** Анализ диссипации энергии в поверхностном слое для контактного электрического сопротивления // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. 2015. Т. 7. № 2. С. 14–24.

20. **Емец Ю. П.** Электрические характеристики трехкомпонентной диэлектрической среды // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1998. Т. 114. № 3. С. 1121–1136.

21. **Александров В. В.** Электрофизика пресных вод. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 184 с.

22. **Бланк Т. В., Гольдберг Ю. А.** Механизмы протекания тока в омических контактах металл – полупроводник // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. № 11. С. 1281–1308.

23. **Lahtiluoma L., Setälä O. E., Vähänissi V., Savin H.** Charged thin film enables dopant free ohmic metal–semiconductor contact formation // Applied Surface Science. 2025. Vol. 701. August 30. P. 163260.

24. **Микушин В. М., Маркова Е. А., Новиков Д. А.** Способ изготовления омического контакта. Пат. 2821299C1, Российская Федерация, МПК H01L21/28, B82Y40/00. Заявитель и патентообладатель: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук. № 2024104072; заявл. 16.02.2024; опубл. 19.06.2024. Бюлл. № 17.

25. **Пахомов В. С.** Коррозия металлов и сплавов. Справочник. Книга 1. М.: Наука и технологии, 2013. 448 с.

26. **Макаров Е. Г.** Инженерные расчеты в Mathcad. М.: Инфра-инженерия, 2024. 408 с.

REFERENCES

1. **Touchaei B. J., Shalchian M.,** A compact Non-Quasi-Static small-signal model for GaN HEMT, Microelectron. J. 148 (6) (2024) 106199.

2. **Abramov I. I., Kolomejceva N. V., Labunov V. A.,** Modeling of advanced nanoelectronic devices. Part I. Models, Nano- i Mikrosistemnaya tekhnika [Nano- and Microsystem Engineering]. 27 (4) (2025) 167–172 (in Russian).

3. **Raut P., Panda D. K., Goyal A. K.,** A comprehensive review on next-generation modeling and optimization for semiconductor devices, IEEE Access. 13 (10 Jul) (2025) 123724–123742.

4. **Zebrev G. I., Malich D. S.,** Analytical physics-based modeling of electron channel density in nanosheet and nanowire transistors, IEEE Trans. Electron Devices. 70 (4) (2023) 1574–1579.

5. **Zavorotnii A. A., Ershov A. A., Filippov V. V., Luzyanin S. E.,** Monitoring the homogeneity of semiconductor films during probe measurements of specific electrical conductivity, Izvestiya Vuzov. Fizika [University News. Physics]. 68 (2) (2025) 82–91 (in Russian).

6. **Filippov V. V., Zavorotniy A. A., Tigrov V. P.,** Modified Van der Pauw method of measuring the electrical conductivity tensor of anisotropic semiconductor films, Russ. Phys. J. 62 (1) (2019) 105–113.

7. **Andreev A. N., Rastegaeva M. G., Rastegaev V. P., Reshanov S. A.,** Allowing for current spreading in semiconductors during measurements of the contact resistivity of ohmic contacts, Semiconductors. 32 (7) (1998) 739–744.

8. **Kostanovski A. V., Zeodinov M. G., Kostanovskaia M. E.,** Specific electrical resistance of silicon carbide nanopowder, Teplofizika vysokih temperatur [High Temperature Thermophysics] 63 (6) (2025) 770–773 (in Russian).

9. **Sze S. M.,** Physics of semiconductor devices, 2-nd edition, John Wiley & Sons, New York, 1981.

10. **Radkevich E. V., Palin V. V.,** Uravneniya matematicheskoj fiziki [Equations of mathematical physics], Lenard Publ., Moscow, 2024 (in Russian).

11. **Polyanin A. D.,** Spravochnik po linejnym uravneniyam matematicheskoj fiziki [Handbook of linear equations of mathematical physics], Fizmatlit, Moscow, 2007 (in Russian).

12. **Petrov B. K., Shalimov O. N.,** Novye metody rascheta elektricheskih poley i probivnyh napryazhenij *p–n* perekhodov v poluprovodnikovyh priborah [New methods for calculating electric fields and breakdown voltages of *p–n* junctions in semiconductor devices], Publ. by Voronezhskiy Gosudarstvenniy Universitet, Voronezh, 2008 (in Russian).

13. **Filippov V. V., Luzyanin S. E., Mitsuk S. V.,** Metody resheniy uravneniy Laplasa i Puassona primenitel'no k elektrodinamike poluprovodnikov [Methods for solving the Laplace and Poisson equations as applied to the electrodynamics of semiconductors], Publ. by Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shansky, Lipetsk, 2023 (in Russian).

14. **Burskii V. P.,** Some new methods for studying boundary value problems for general partial differential equations, Theor. Math. Phys. 218 (1) (2024) 41–50.

15. **Algazin O. D., Kopaev O. V.,** Solution of the mixed boundary-value problem for Laplace equation in multidimensional infinite layer, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Ser. “Natural Sciences”. (1(58)) (2015) 3–13 (in Russian).

16. **Filippov V. V.,** Osobennosti yavlenij elektronnogo perenosa v anizotropnyh poluprovodnikah [Features of electron transport phenomena in anisotropic semiconductors], Sputnik+ Publ., Moscow, 2015 (in Russian).

17. **Matveev A. N.,** Electricity and magnetism (Translated from the Russian by R. Wadhwa and N. Deineko) Mir Publishers, Moscow, 1986.

18. **Ershov A. A.,** Asymptotics of the solution of Laplace’s equation with mixed boundary conditions, Comput. Math. Math. Phys. 51 (6) (2011) 994–1010.

19. **Dmitriev A. V., Ershov A. A.,** The analysis of energy absorption in a blanket for contact electric resistance, Bull. South Ural State University. Ser. “Math. Mech. Phys.” 7 (2) (2015) 14–24 (in Russian).

20. **Emets Y. P.,** Electrical characteristics of three-component dielectric media, J. Exp. Theor. Phys. 87 (3) (1998) 612–620.

21. **Alexandrov V. V.,** Elektrofizika presnyh vod [Fresh water electrophysics], Gidrometeoizdat Publ., Leningrad, 1985 (in Russian).

22. **Blank T. V., Gol'dberg Yu. A.,** Mechanisms of current flow in metal-semiconductor ohmic contacts, Semiconductors. 41 (11) (2007) 1263–1292.

23. **Lahtiluoma L., Setälä O. E., Vähänissi V., Savin H.,** Charged thin film enables dopant free ohmic metal–semiconductor contact formation, Appl. Surf. Sci. 701 (8) (2025) 163260.

24. **Mikushin V. M., Markova E. A., Novikov D. A.,** Sposob izgotovleniya omicheskogo kontakta [Method for manufacturing an ohmic contact], Pat. No. RU 2821299C1, Russian Federation; MPC H01L21/28, B82Y40/00; Federal State Budgetary Scientific Institution A. F. Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences is a declarant and patentee. No. 2024104072; declar. 16.02.2024, publ. 19.06.2024. Bull. No. 17 (in Russian).

25. **Pakhomov V. S.,** Korroziya metallov i splavov. Spravochnik. Kniga 1 [Corrosion of metals and alloys. Reference Book 1], Nauka Publishing, Moscow, 2013 (in Russian).
26. **Makarov E. G.,** Inzhenernye raschety v Mathcad [Engineering calculations in Mathcad], Infra-Engineering, Moscow, 2024 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФИЛИППОВ Владимир Владимирович – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики и биомедицинской техники Липецкого государственного технического университета; профессор кафедры математики и физики Липецкого государственного педагогического университета имени П. П. Семенова-Тян-Шанского, г. Липецк, Россия.*
398600, Россия, г. Липецк, Московская ул., 30
wwfilippow@mail.ru
ORCID: 0000-0003-4323-351X

ЕРШОВ Александр Анатольевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела динамических систем Института математики и механики имени Н. Н. Красовского Уральского отделения РАН; доцент кафедры математического анализа Института естественных наук и математики Уральского федерального университета имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.*
620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 16
ale10919@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-9685-9711

THE AUTHORS

FILIPPOV Vladimir V.
Lipetsk State Technical University,
Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shansky
30, Moskovskaya St., Lipetsk, 398600, Russia
wwfilippow@mail.ru
ORCID: 0000-0003-4323-351X

ERSHOV Aleksandr A.
Institute of Mathematics and Mechanics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
Ural Federal University named after first president of Russia B. N. Yeltsin
16, S. Kovalevskaya St., Ekaterinburg, 620990, Russia
ale10919@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-9685-9711

Статья поступила в редакцию 11.02.2026. Одобрена после рецензирования 13.04.2026. Принята 13.04.2026.
Received 11.02.2026. Approved after reviewing 13.04.2026. Accepted 13.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Original article
UDC 544.171.42
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19306

CALCULATIONS OF PHOTOELECTRON EMISSION SPECTRA RESULTING FROM ATOMIC 1*s* SHELL PHOTOIONIZATION FOLLOWED BY SEQUENTIAL RADIATIVE AND AUGER DECAYS OF INNER VACANCIES

L. G. Gerchikov [1] ✉, S. A. Sheinerman [2]

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

[2] State Marine Technical University, St. Petersburg, Russia

✉ lgerchikov@mail.ru

Abstract. Photoelectron emission from 1*s* shell photoionization of an argon atom and a carbonyl sulfide (OCS) molecule followed by sequential X-ray radiative and Auger decays has been theoretically studied within *ab initio* quantum many-body approach. Energy spectra of electron emission are calculated for photoelectrons registered in non-coincident with Auger electrons measurements and compared with experimental data. Prominent postcollision interaction distortion of the photoelectron energy spectra is reported. The quantum many-body approach employed provides more accurate description of photoelectron emission than simple approximate model used earlier.

Keywords: inner-shell photoionization, postcollision interaction, Auger decay, argon atom, carbonyl sulfide molecule

For citation: Gerchikov L. G., Sheinerman S. A., Calculations of photoelectron emission spectra resulting from atomic 1*s* shell photoionization followed by sequential radiative and Auger decays of inner vacancies, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 63–72. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19306

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

Научная статья
УДК 544.171.42
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19306

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ ПРИ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМНЫХ 1*s*-ОБОЛОЧЕК, СОПРОВОЖДАЮЩЕЙСЯ ПОСЛЕДУЮЩИМИ РАДИАЦИОННЫМ И ОЖЕ РАСПАДАМИ ВНУТРЕННИХ ВАКАНСИЙ

Л. Г. Герчиков [1] ✉, С. А. Шейнерман [2]

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

[2] Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Россия

✉ lgerchikov@mail.ru

Аннотация. В работе исследована методом квантовой теории многих тел фотоионизация 1*s*-оболочки атома аргона и молекулы сульфида карбонила (OCS) с последующими радиационным и Оже распадами внутренних вакансий. Энергетические спектры электронной эмиссии были рассчитаны для электронов, регистрируемых без совпадения с

© Gerchikov L. G., Sheinerman S. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Оже-электронами, и сравнены с ранее полученными экспериментальными спектрами. Обнаружено заметное искажение спектров фотоэлектронов, вызванное послестолкновительным взаимодействием. Примененный метод квантовой теории многих тел обеспечил лучшее согласие с экспериментом, по сравнению с простой приближенной моделью, используемой ранее.

Ключевые слова: фотоионизация глубоких оболочек, послестолкновительное взаимодействие, Оже-распад, атом аргона, сульфид карбонила

Для цитирования: Герчиков Л. Г., Шейнерман С. А. Расчет спектров фотоэлектронной эмиссии, возникающей при фотоионизации атомных 1*s*-оболочек, сопровождающейся последующими радиационным и Оже распадами внутренних вакансий // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 63–72. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19306

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

Introduction

Photoionization of a deep atomic shell leads to the formation of an inner vacancy. The subsequent decay of this vacancy can occur through various channels including radiative and non-radiative processes. The most common example of non-radiative decay channel is the Auger decay of an inner vacancy with the emission of a fast Auger electron. This process called the single Auger decay (SA) is well known and has been widely studied in recent several decades. An interest of researchers is related to the fact that three resulting particles, namely, a photoelectron, an Auger electron, and a residual ion interact with each other by the Coulomb forces. Such interaction leads to a strong distortion of the spectra of emitted electrons: these spectra are shifted and their line shapes become asymmetrical. This effect is known as postcollision interaction (PCI) and has been well studied both experimentally [1 – 5] and theoretically within a number of models [6 – 13].

Another way of the deep vacancy decay can occur via the radiative transition. This process is becoming increasingly important for *K*-shell vacancies of heavy atoms since the fluorescence yields increase rapidly with the atomic number *Z* [14, 15]. In this case, an electron of higher inner shell fills in the deep vacancy with creation of the intermediate inner-shell vacancy and emission of a photon. After that, in the next step, the intermediate inner-shell vacancy undergoes Auger decay with the fast Auger electron emission. Such a process of the sequential radiative and Auger decays (SRAD) of an inner vacancy has been studied mainly experimentally in the last decade [16 – 23]. Both coincidence and noncoincidence measurements of the photoelectron spectra and the Auger electron spectra reveal the PCI distortion of the measured electron spectra.

The proper description of PCI effects in the SRAD processes should take into account the energy sharing between three emitted particles, namely, a photoelectron, an Auger electron and an emitted photon. Instead, the first attempts of theoretical consideration of the SRAD process reduced the problem to a simpler SA decay with some effective decay width of the deep vacancy [17]. Within this model, the real three-step SRAD process is replaced by the two-step photoionization process of the deep shell followed by the SA decay of created vacancy where the real lifetime width of this vacancy is changed to some effective value Γ_{eff}. The Γ_{eff} value is chosen to adjust the decay time of an inner vacancy to cumulative time of sequential radiative decay, $\tau_r = 1/\Gamma_{1s}$, and the Auger decay, $\tau_A = 1/\Gamma_{2p}$, namely, $\Gamma_{eff} = 1/(\tau_r + \tau_A)$.

The more sophisticated approach for the description of the Auger electron spectra in the SRAD process developed in Ref. [21] on the basis of the model of the multiple Auger decay (proposed earlier in Ref. [24]) considers the SRAD as a three-step process. However, this approach as well as the simpler effective width model does not take into account the participation of the emitted photon in the energy sharing. Both the model of the effective width (see Ref. [17]) and the quantum model of Ref. [21] show a good agreement with noncoincidence measurements of the PCI distorted Auger electron spectra [21, 22]. However, an application of the effective width model to the noncoincidence measurements of the photoelectron spectra shows less satisfactory

© Герчиков Л. Г., Шейнерман С. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

agreement [17]. This disagreement reflects a serious shortcoming of the approximations [17, 21], namely, these models do not take into account the participation of the emitted photon in the PCI energy exchange.

Meanwhile, an *ab initio* quantum many-body approach for the SRAD process was recently developed in Ref. [16]. Calculations of the PCI distortion of the electron spectra within this approach showed an excellent agreement with both the noncoincidence measurements of the Auger electron spectra and the photoelectron spectra measured in coincidence with the Auger electrons [16]. However, a comparison of the available experimental data on the noncoincident photoelectron spectra [17, 25] with the results of the developed approach [16] has not been done so far. In experimental studies [17, 25] the Auger electrons were not registered while the photoelectrons were detected in coincidence with the ion valence. In Ref. [17], the spectra of photoelectron emission were studied in the SRAD process of the argon 1s shell photoionization. The similar process of the 1s shell photoionization of the S atom in the OCS molecule has been studied in Ref. [25].

In the present paper, we have applied our quantum many-body theory [16] to the SRAD photoionization processes studied experimentally in Refs. [17, 25]. We have compared the experimental spectra with results of *ab initio* quantum many-body approach and the effective width model. A comparison has revealed a noticeable difference between the experimental results and predictions of the effective width model and has showed rather well agreement with calculations results of our quantum many-body approach.

Our paper is organized as follows: in the next section we outline shortly our theoretical approach [16]. In the section following it, we present the calculated photoelectron spectra and compare them with experimental results [17, 25]. The atomic system of units, $|e| = m_e = \hbar = 1$, is used throughout the paper.

Photoelectron spectra in the SRAD process

An emission of a photoelectron from the deep 1s atomic shell followed by the SRAD decay of inner vacancy is a three-step cascade process which can be presented by the following scheme:

$$\gamma_0 + A \to A^{+*}(1s^{-1}) + e_{ph} \to A^{+*}(2p^{-1}) + \gamma_1 + e_{ph} \to A_f^{2+}(3p^{-2}) + \gamma_1 + e_{ph} + e_A. \qquad (1)$$

The first step is the ionization of the 1s shell of the atomic target A by the incident photon γ_0 of energy ω_0 resulting in emission of a photoelectron e_{ph} and creation of a quasi-stationary $1s^{-1}$ vacancy. The second step is the radiative decay of the $1s^{-1}$ vacancy resulting in emission of a photon γ_1 of energy ω_1 and creation of an intermediate quasi-stationary $2p^{-1}$ vacancy. The last step is an Auger decay of the $2p^{-1}$vacancy resulting in emission of an Auger electron e_A of energy E_A leaving the residual ion with two vacancies in the outer shell, $A_f^{2+}(3p^{-2})$.

An amplitude of the process (1) was recently developed in Ref. [16] by means of the quantum many-body theory:

$$A_{SRAD} = \frac{iM_0M_1M_A\left(\left\langle \chi_{E_{ph}} \middle| \chi^{(+)}_{\omega_0+E_{1s}+\frac{i}{2}\Gamma_1}\right\rangle - \left\langle \chi_{E_{ph}} \middle| \chi^{(+)}_{\omega_0-\omega_1+E_{2p}+\frac{i}{2}\Gamma_2}\right\rangle\right)}{\omega_1 - E_{2p} + E_{1s} - \frac{i}{2}\left(\Gamma_2 - \Gamma_1\right)}, \qquad (2)$$

where M_0, M_1, M_A are the matrix elements of photoabsorption, photoemission and Auger decay, respectively, that are weakly dependent on the energies of the emitted electrons; E_{1s}, E_{2p} are the $1s$ shell and $2p$ shell electron energies, respectively; $\Gamma_{1,2}$ denotes the decay widths of $1s^{-1}$ and $2p^{-1}$ vacancies, respectively; $\langle \chi | \chi^{(+)} \rangle$ are the overlap integrals between the photoelectron radial wave functions in the intermediate and final states before and after the Auger decay.

The wave function of the final electron state $\chi_{E_{ph}}$ is a standing wave which describes the motion of the outgoing photoelectron with energy E_{ph} in the Coulomb fields of the double charged residual ion and the Auger electron. The wave function of an intermediate electron state $\chi_E^{(+)}$ behaves asymptotically as an outgoing wave and describes the photoelectron motion in the field of a single charged ion before the Auger decay. Radiative decay of the $1s^{-1}$ vacancy does not change the charge of the ionized atom A^{+*}. Therefore, it does not alternate the long-range Coulomb field acting on the outgoing photoelectron. Indeed, its typical distance from the target

atom, at the moment of the $1s^{-1}$ vacancy decay, is

$$r \sim \nu_{ph}\tau_r = \nu_{ph}/\Gamma_1 \gg 1.$$

This crucial fact that the PCI takes place at large distances is related with small values of the inner vacancies decay width, $\Gamma \ll 1$.

There are two overlap integrals in the right-hand side of Eq. (2). In the first one, the energy of intermediate electron state corresponds to the stage after the ionization and prior the radiative decay:

$$E_1 = \omega_0 + E_{1s} + (i/2)\,\Gamma_1 = \Delta E + (i/2)\,\Gamma_1. \quad (3)$$

This energy is complex because the ionized atom $A^{+*}(1s^{-1})$ with deep $1s^{-1}$ vacancy is metastable. Its imaginary part corresponds to the $1s^{-1}$ vacancy decay width Γ_1, and its real part

$$\mathrm{Re}\{E_1\} = \omega_0 + E_{1s} = \Delta E$$

is the excess photon energy above the $1s$ shell ionization threshold.

Consequently, the amplitude of the intermediate photoelectron wave function slowly decays as $\left|\chi_E^{(+)}\right|^2 \propto \exp(-\Gamma_1 r / v_{ph})$ which confirms the estimation of typical PCI distances made above.

The energy of a photoelectron intermediate state in the second overlap integral

$$E_2 = \omega_0 - \omega_1 + E_{2p} + (i/2)\,\Gamma_2 = \Delta E - \omega_1 + E_{2p} - E_{1s} + (i/2)\,\Gamma_2 = \Delta E - \delta\omega_1 + (i/2)\,\Gamma_2 \quad (4)$$

corresponds to the stage between the radiative decay of $1s^{-1}$ vacancy with emission of a photon γ_1 of energy ω_1 and creation of the intermediate $2p^{-1}$ vacancy and the Auger decay of the $2p^{-1}$ vacancy. Its real part differs from the excess photon energy ΔE by the energy distance of the emission photon energy from its resonance value

$$\delta\omega_1 = \omega_1 - E_{2p} + E_{1s},$$

and its imaginary part corresponds to the $2p^{-1}$ vacancy decay width Γ_2.

The square of modulus of the amplitude $A_{\mathrm{SRAD}}(\omega_0, E_{ph}, E_A)$ determines the triple differential cross section of the process (1):

$$\frac{d^3\sigma}{dE_{ph}\,d\omega_1\,dE_A} \propto |A_{\mathrm{SRAD}}(\Delta E, E_{ph}, E_A)|^2\ \delta\left(E_{ph} + E_A + \omega_1 - 2E_{3p} - \omega_0\right). \quad (5)$$

It is worth to note that the amplitude A_{SRAD} (see Eq. (2)) depends on the incident photon energy ω_0 and the energies of three emitted particles ω_1, E_{ph}, E_A. But, due to the energy conservation law

$$E_{ph} + E_A + \omega_1 - 2E_{3p} - \omega_0 = 0, \quad (6)$$

two final energies only, e.g., E_{ph} and E_A, can be considered as independent parameters, as it is written by Eq. (5).

In this paper, we have analyzed the spectra of the photoelectrons measured in the SRAD processes in coincidence with the valence of the residual ion only. It means that the energy E_A of the Auger electrons as well as the emitted photon energy ω_1 is not fixed and a yield of the Auger electrons with all possible energies contributes to the measured photoelectron spectrum. Hence, the measured photoelectron yield is given by the triple differential cross section (see Eq. (5)) integrated over all the Auger electron E_A and photon ω_1 energies:

$$\frac{d\sigma}{dE_{ph}} = \int_0^\infty |A_{\mathrm{SRAD}}(\omega_0, E_{ph}, E_A)|^2\, dE_A. \quad (7)$$

Results and discussion

The energy spectra of photoelectrons emitted in the 1s shell ionization followed by the SRAD decay of an inner vacancy were earlier measured for the Ar atom [17] and for the S atom in the OCS molecule [25]. The SRAD process is the main channel of the $1s^{-1}$ vacancy decay of the systems considered which leads to the double charged residual ion [15, 26, 27]. Hence, the coincidences of photoelectron emission with the ion valence used in the measurements [17, 25] can guarantee that the main contribution to the measured photoelectron spectra comes from the process (1).

We have calculated the photoelectron spectra of the Ar atom and S atom according to the Eqs. (2) – (7). The overlap integrals in the amplitude $A_{\mathrm{SRAD}}(\omega_0, E_{ph}, E_A)$ were evaluated within the semiclassical Wentzel – Kramers – Brillouin (WKB) approximation [12, 16]. This approximation is widely used for such calculations because the PCI takes place at large distances from the target atom where the electronic motion is semiclassical. The main advantage of WKB approximation is that it gives the closed analytical expression for overlap integral (see e.g., Refs. [12, 16]).

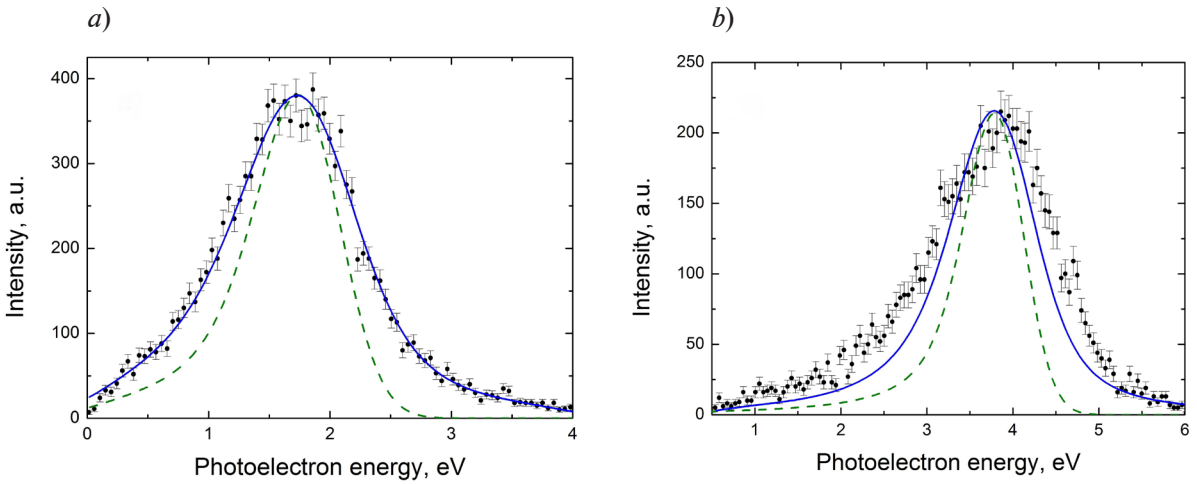


Fig. 1. Experimental (black circles) [17] and calculated (blue solid lines) photoelectron energy spectra in Ar $1s^2$ photoionization followed by the SRAD process for the excess photon energy $\Delta E = 2.0$ eV (*a*) and $\Delta E = 4.0$ eV (*b*). The calculations have been carried out within the quantum many-body approachaccording to Eqs. (2) – (7); the green dashed lines present the results of the effective width model

For Ar atom the parameters of the SRAD process are as follows [16]:
the $1s$ photoionization threshold energy $E_{1s} = -3206.3$ eV [28],
the energy of radiative transition $E_{2p} - E_{1s} = 2957$ eV,
the decay width of the vacancy is $\Gamma_1 = 0.69$ eV [14],
for the $2p$ vacancy the decay width is $\Gamma_2 = 0.118$ eV [29].
For the S atom in the OCS molecule we have used the following values of the widths:
$\Gamma_{1s} = 600$ meV and $\Gamma_{2p} = 60$ meV [14].

Finally, the cross section (7) was convoluted with a Gaussian profile of 700 meV width (in the case of Ar atom) and 1000 meV width (in the case of OCS molecule) to simulate the spectrometer resolution [17, 25].

In Fig. 1 we show calculated photoelectron spectra together with the experimental results [17] for photoionization of Ar atom at the excess photon energy above the threshold $\Delta E = 2.0$ eV and $\Delta E = 4.0$ eV, respectively. In addition, we show the photoelectron spectra calculated within the effective width model for comparison.

All spectra demonstrate the notable PCI distortion. Their maxima are red shifted against the nominal energy values of ΔE and line shapes become asymmetrical. Both the measurement and the calculations reveal these features. Earlier this fact was established for the single and multiple Auger decay processes [1 – 3]. Now this PCI distortion manifests itself in the SRAD processes too.

Fig. 1, *a* shows an excellent agreement between the measured photoelectron spectrum and calculation results of quantum mechanical approach presented here. The effective width model curve demonstrates poorer agreement with experimental spectrum. The effective width model noticeably underestimates the line shape width. Both theoretical curves show correct PCI energy shift $\Delta E_{ph} = -0.27$ eV of line shape maximum against the photon excess energy $\Delta E = 2.0$ eV. According to Fig. 1, *b* the PCI energy shift $\Delta E_{ph} = -0.22$ eV at the photon excess energy $\Delta E = 4.0$ eV is 50 meV lower than that at $\Delta E = 2.0$ eV. The higher the photon energy, the higher the photoelectron velocity becomes and, consequently, the PCI takes place at longer distances.

The PCI weakens with increasing interparticle distances. Therefore, PCI effects decrease at higher excess photon energies. Fig. 1, *b* shows that the quantum mechanical approach presented here provides better agreement with the experimental spectrum than the effective width model at $\Delta E = 4.0$ eV too. Though this agreement is not so perfect as that at $\Delta E = 2.0$ eV.

In Fig. 2 we compare the theoretical results with experimental spectrum measured for the 1s shell ionization of S atom in the OCS molecule [25] at the excess photon energy $\Delta E = 4.4$ eV. The black circles in Fig. 2 present the measured photoelectron spectrum recorded in coincidence with the molecular ion OCS^{2+} and the molecular fragments $CO^{+} + S^{+}$. Similarly to the ionization of argon atom the consistent quantum many-body approach provides here better agreement with the experimental spectrum than that resulted from the effective width model. The line shape of the effective width model is narrower and somewhat blue shifted in comparison to the results of quantum many-body approach. The PCI energy shift $\Delta E_{ph} = -0.24$ eV of the photoelectron line shape provided by the quantum many-body approach is greater than that in the effective width model $\Delta E_{ph} = -0.14$ eV and correlates better with the experimental spectrum.

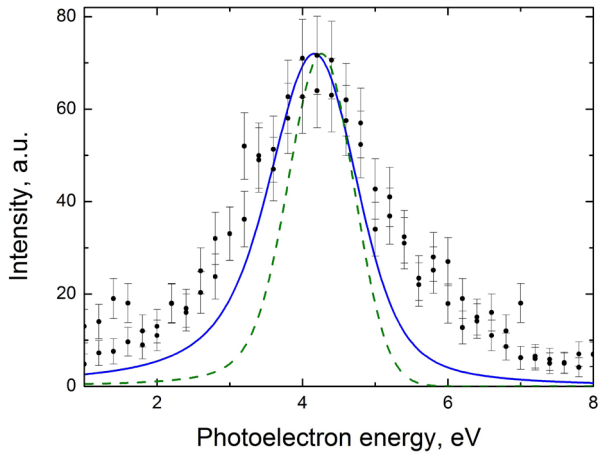


Fig. 2. The photoelectron energy spectrum in $1s^2$ photoinization of S atom in the OCS molecule followed by the SRAD process for the excess photon energy $\Delta E = 4.4$ eV. Black circles present the measured values [25]; the blue solid line shows the photoelectron spectrum calculated within quantum many-body approach according to Eqs.(2) – (7); the green dashed line presents the results of the effective width model

According to the Figs. 1, 2 the main shortcoming of the effective width model is that it underestimates systematically the photoelectron line width. It happens because in the SRAD processes in Ar and S atoms the radiative decay width Γ_1 is much larger than the width Γ_2 of the Auger decay. Indeed, in the argon atom the widths of 1*s* and 2*p* vacancies are equal to 0.69 eV and 0.118 eV, respectively. In the S atom their ratio is even higher: $\Gamma_{1s} = 600$ meV and $\Gamma_{2p} = 60$ meV. In Ref. [16] it was demonstrated that the line width of the photoelectron spectrum is determined to more extend by the radiative decay width Γ_1 while the Auger electron line width is closer to the Auger decay width Γ_2. On the other hand, the value of the effective width $\Gamma_{eff} = \Gamma_1 \Gamma_2 / (\Gamma_1 + \Gamma_2)$ in the case of $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$ is closer to the smallest one, Γ_2. For the argon atom the effective width model gives $\Gamma_{eff} = 101$ meV versus $\Gamma_{1s} = 690$ meV and in the OCS case $\Gamma_{eff} = 55$ meV versus $\Gamma_{1s} = 600$ meV. That is why the effective width model fails to reproduce correctly the photoelectron spectrum. This shortcoming of the effective width model is partly compensated by the low energy resolution of electron spectrometers used in the experiments [17, 25] 0.7 eV and 1.0 eV, respectively. Convolution of the effective width model line shape with the Gaussian profile of Full Width at Half Maximum (FWHM) that equals to the energy resolution makes the results of the effective width model much closer to the experimental spectrum. It is worth to note, that the broadening of the effective width model line shape increases its PCI energy shift. Indeed, in the case of the argon ionization, the PCI energy shifts provided by the effective width model without convolution amount to $\Delta E_{ph} = -150$ meV and $\Delta E_{ph} = -80$ meV for $\Delta E = 2.0$ eV and $\Delta E = 4.0$ eV, respectively.

These values are considerably smaller than the PCI energy shifts of the convoluted effective width curves for the considered excess energies $\Delta E_{ph} = -270$ meV and $\Delta E_{ph} = -220$ meV, respectively, which are quite close to the experimental findings.

Conclusion

The *ab initio* quantum many-body approach developed in Ref. [16] has been applied for calculations of energy spectra of photoelectrons emitted in 1s shell photoionization of Ar atom and S atom in OCS molecule followed by the SRAD process. The comparison of calculation results with experimental spectra obtained earlier by non-coincidence photoelectron measurements demonstrates quite well agreement. We report a prominent PCI distortion of photoemission energy spectra associated with the SRAD photoionization process. We have also compared the theoretical and experimental spectra with the results of the effective width model. Our calculations demonstrate that the quantum many-body approach provides much more accurate description of the considered photoemission spectra than the approximate model of the effective width. Applying to the photoelectron spectrum the effective width model underestimates considerably its line width and the more consistent quantum many-body approach is needed for the correct description of electron emission resulting from the inner shell photoionization followed by the SRAD process.

REFERENCES

1. **Kuchiev M. Y., Sheinerman S.,** Post-collision interaction in atomic processes, Sov. Phys. −Usp. 32 (7) (1989) 569−587.

2. **Schmidt V.,** Photoionization of atoms using synchrotron radiation, Rep. Prog. Phys. 55 (9) (1992) 1483−1659.

3. **Schmidt V.,** Electron spectrometry of atoms using synchrotron radiation (Book Ser. "Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics", Vol. 6). Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.

4. **Guillemin R., Sheinerman S., Püttner R., et al.,** Postcollision interaction effects in *KLL* Auger spectra following argon 1*s* photoionization, Phys. Rev. A. 92 (1) (2015) 012503.

5. **Sheinerman S., Lablanquie P., Penent F., et al.,** PCI effects in argon 2p double Auger decay probed by multielectron coincidence methods, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (11) (2010) 115001.

6. **Barker R. B., Berry H. W.,** Electron energy distributions from ionizing collisions of helium and neon ions with helium, Phys. Rev. 151(1) (1966) 14−19.

7. **Niehaus A.,** Analysis of post-collision interaction in Auger processes following near-threshold inner-shell photoionization, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 10 (10) (1977) 1845−1857.

8. **Armen G. B., Tulkki J., Aberg T., Crasemann B.,** Quantum theory of post-collision interaction in inner-shell photoionization: Final-state interaction between two continuum electrons, Phys. Rev. A. 36 (12) (1987) 5606−5614.

9. **Russek A., Mehlhorn W.,** Post-collision interaction and the Auger lineshape, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 19 (6) (1986) 911−928.

10. **Kuchiev M. Yu., Sheinerman S. A.,** Resonant processes involving the production of three charged particles, Sov. Phys. JETP. 63 (5) (1986) 986−990.

11. **Koike F.,** Theory of post-collision interaction at high excess energies, J. Phys. Soc. Japan. 57 (8) (1988) 2705−2710.

12. **Van der Straten P., Morgenstern R., Niehaus A.,** Angular dependent post-collision interaction in Auger processes, Z. Phys. D. 8 (1) (1988) 35−45.

13. **Kazansky A. K., Kabachnik N. M.,** Non-stationary theory for short pulse near-threshold photoionization of inner atomic shells, Phys. Rev. A. 72 (5) (2005) 052714.

14. **Krause M. O.,** Atomic radiative and radiationless yields for *K* and *L* shells, J. Phys. Chem. Ref. Data. 8 (2) (1979) 307−326.

15. **Alkemper U., Doppelfeld J., von Busch F.,** L_{23}−*MM* Auger spectrum of *K*-ionized argon: decomposition by electron-ion and electron-electron coincidence techniques, Phys. Rev. A. 56 (4) (1997) 2741−2749.

16. **Gerchikov L., Lablanquie P., Palaudoux J., et al.,** Postcollision interaction in sequential X-ray radiative and Auger decays after atomic inner-shell photoionization, Phys. Rev. A. 107 (6) (2023) 062822.

17. **Guillemin R., Sheinerman S., Bomme C., et al.,** Ultrafast dynamics in postcollision interaction after multiple Auger decays in argon 1*s* photoionization, Phys. Rev. Lett. 109 (1) (2012) 013001.

18. **Piancastelli M. N., Jankala K., Joumel L., et al.,** X-ray versus Auger emission following Xe 1*s* photoionization, Phys. Rev. A. 95 (6) (2017) 061402(R).

19. **Boudojemia N., Jankala K., Püttner R. et al.,** Deep-core photoionization of krypton atoms below and above the 1*s* ionization threshold, Phys. Rev. A. 101 (5) (2020) 053405.

20. **Kosugi S., Guillemin R., Travnikova O., et al.,** Postcollision-interaction effects in multistep Auger transitions following Ar 1*s* photoionization, Phys. Rev. A. 106 (3) (2022) 033114.

21. **Kosugi S., Koike F., Iizawa M., et al.,** Fluorescence time delay in multistep Auger decay as an internal clock, Phys. Rev. Lett. 124 (18) (2020) 183001.

22. **Li S., Koulentianos D., Southworth S. H. et al.,** Manifestation of post-collision interaction in krypton *LMN* Auger spectra following *K*-shell photoionization, Phys. Rev. A. 106 (2) (2022) 023110.

23. **Pelimanni E., Doumy G., Ho P. J., et al.,** Fluorescence-mediated post-collision interaction in X-ray photoionization of the Xe *K* edge, Phys. Rev. A. 110 (2) (2024) 023117.

24. **Koike F.,** Many-electron effects in post-collision interaction spectra created by Auger cascade in atoms, Phys. Lett. A. 193 (2) (1994) 173–178.

25. **Bomme C., Guillemin R., Sheinerman S., et al.,** Post-collision interaction manifestation in molecular systems probed by photoelectron-molecular ion coincidences, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46 (21) (2013) 215101.

26. **Esser B., Ankerhold U., Anders N., von Busch F.,** Decay of CS_2 and OCS after sulphur 1*s* photoexcitation: I. Total ionic charge spectra and electronic processes, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (5) (1997) 1191–1206.

27. **Ankerhold U., Esser B., von Busch F.,** Decay of CS_2 and OCS after sulphur 1*s* photoexcitation: II. Dissociation channels and kinematics, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (5) (1997) 1207–1222.

28. **Ueda K., Shigemasa E., Sato Y., et al.,** Threshold behaviour of the multiply-charged photoion yields near the Ar *K* edge, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24 (3) (1991) 605.

29. **Jurvansuu M., Kivimaki A., Aksela S.,** Inherent lifetime widths of Ar $2p^{-1}$, Kr $3d^{-1}$, Xe $3d^{-1}$ and Xe $4d^{-1}$ states, Phys. Rev. A. 64 (1) (2001) 012502.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кучиев М. Ю., Шейнерман С. А.** Послестолкновительное взаимодействие в атомных процессах // Успехи физических наук. 1989. Т. 158. № 3. С. 353–387.

2. **Schmidt V.** Photoionization of atoms using synchrotron radiation // Reports on Progress in Physics. 1992. Vol. 55. No. 9. Pp. 1483–1659.

3. **Schmidt V.** Electron spectrometry of atoms using synchrotron radiation (Book Series “Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics”. Vol. 6). Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1997. 431 p.

4. **Guillemin R., Sheinerman S., Püttner R., Marchenko T., Goldsztejn G., Journel L., Kushawaha R. K., Céolin D., Piancastelli M. N., Simon M.** Postcollision interaction effects in *KLL* Auger spectra following argon 1*s* photoionization // Physical Review A. 2015. Vol. 92. No. 1. P. 012503.

5. **Sheinerman S., Lablanquie P., Penent F., Hikosaka Y., Kaneyasu T., Shigemasa E., Ito K.** PCI effects in argon 2*p* double Auger decay probed by multielectron coincidence methods // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2010. Vol. 43. No. 11. P. 115001.

6. **Barker R. B., Berry H. W.** Electron energy distributions from ionizing collisions of helium and neon ions with helium // Physical Review. 1966. Vol. 151. No. 1. Pp. 14–19.

7. **Niehaus A.** Analysis of post-collision interaction in Auger processes following near-threshold inner-shell photoionization // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.1977. Vol. 10. No. 10. Pp. 1845 –1857.

8. **Armen G. B., Tulkki J., Aberg T., Crasemann B.** Quantum theory of post-collision interaction in inner-shell photoionization: Final-state interaction between two continuum electrons // Physical Review A. 1987. Vol. 36. No. 12. Pp. 5606–5614.

9. **Russek A., Mehlhorn W.** Post-collision interaction and the Auger lineshape // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.1986. Vol. 19. No. 6. Pp. 911–928.

10. **Kuchiev M. Yu., Sheinerman S. A.** Resonant processes involving the production of three charged particles // Sov. Phys. JETP. 1986. Vol. 63. No. 5. Pp. 986–990.

11. **Koike F.** Theory of post-collision interaction at high excess energies // Journal of the Physical Society of Japan. 1988. Vol. 57. No. 8. Pp. 2705–2710.

12. **Van der Straten P., Morgenstern R., Niehaus A.** Angular dependent post-collision interaction in Auger processes // Zeitschrift für Physik D: Atoms, Molecules and Clusters. 1988. Vol. 8. No. 1. Pp. 35–45.

13. **Kazansky A. K., Kabachnik N. M.** Non-stationary theory for short pulse near-threshold photoionization of inner atomic shells // Physical Review A. 2005. Vol. 72. No. 5. P. 052714.

14. **Krause M. O.** Atomic radiative and radiationless yields for *K* and *L* shells // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 1979. Vol. 8. No. 2. Pp. 307–326.

15. **Alkemper U., Doppelfeld J., von Busch F.** $L_{23} - MM$ Auger spectrum of *K*-ionized argon: decomposition by electron-ion and electron-electron coincidence techniques // Physical Review A. 1997. Vol. 56. No. 4. Pp. 2741–2749.

16. **Gerchikov L., Lablanquie P., Palaudoux J., Penent F., Sheinerman S.** Postcollision interaction in sequential X-ray radiative and Auger decays after atomic inner-shell photoionization // Physical Review A. 2023. Vol. 107. No. 6. P. 062822.

17. **Guillemin R., Sheinerman S., Bomme C., et al.** Ultrafast dynamics in postcollision interaction after multiple Auger decays in argon 1*s* photoionization // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. No. 1. P. 013001.

18. **Piancastelli M. N., Jankala K., Joumel L., Gejo T., Kohmura Y., Huttula M., Simon M., Oura M.** X-ray versus Auger emission following Xe 1*s* photoionization // Physical Review A. 2017. Vol. 95. No. 6. P. 061402(R).

19. **Boudojemia N., Jankala K., Püttner R., et al.** Deep-core photoionization of krypton atoms below and above the 1*s* ionization threshold // Physical Review A. 2020. Vol. 101. No. 5. P. 053405.

20. **Kosugi S., Guillemin R., Travnikova O., et al.** Postcollision-interaction effects in multistep Auger transitions following Ar 1*s* photoionization // Physical Review A. 2022. Vol. 106. No. 3. P. 033114.

21. **Kosugi S., Koike F., Iizawa M., et al.** Fluorescence time delay in multistep Auger decay as an internal clock // Physical Review Letters. 2020. Vol. 124. No. 18. P.183001.

22. **Li S., Koulentianos D., Southworth S. H., et al.** Manifestation of postcollision interaction in krypton *LMN* Auger spectra following *K*-shell photoionization // Physical Review A. 2022. Vol. 106. No. 2. P. 023110.

23. **Pelimanni E., Doumy G., Ho P. J., et al.** Fluorescence-mediated postcollision interaction in X-ray photoionization of the Xe *K* edge // Physical Review A. 2024. Vol. 110. No. 2. P. 023117.

24. **Koike F.** Many-electron effects in post-collision interaction spectra created by Auger cascade in atoms // Physics Letters A. 1994. Vol. 193. No. 2. Pp. 173–178.

25. **Bomme C., Guillemin R., Sheinerman S., Marin T., Journel L., Marchenko T., Kushawaha R. K., Trcera N., Piancastelli M. N., Simon M.** Post-collision interaction manifestation in molecular systems probed by photoelectron-molecular ion coincidences // Journal of Physics B.: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2013. Vol. 46. No. 21. P. 215101.

26. **Esser B., Ankerhold U., Anders N., von Busch F.** Decay of CS_2 and OCS after sulphur 1*s* photoexcitation: I. Total ionic charge spectra and electronic processes // Journal of Physics B.: Atomic, Molecular and Optical Physics.1997. Vol. 30. No. 5. Pp. 1191–1206.

27. **Ankerhold U., Esser B., von Busch F.** Decay of CS_2 and OCS after sulphur 1*s* photoexcitation: II. Dissociation channels and kinematics // Journal of Physics B.: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1997. Vol. 30. No. 5. Pp. 1207–1222.

28. **Ueda K., Shigemasa E., Sato Y., Yagishita A., Ukai M., Maezawa H., Hayaishi T., Sasaki T.** Threshold behaviour of the multiply-charged photoion yields near the Ar *K* edge // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1991. Vol. 24. No. 3. P. 605.

29. **Jurvansuu M., Kivimaki A., Aksela S.** Inherent lifetime widths of Ar $2p^{-1}$, Kr $3d^{-1}$, Xe $3d^{-1}$ and Xe $4d^{-1}$ states // Physical Review A. 2001. Vol. 64. No. 1. P. 012502.

THE AUTHORS

GERCHIKOV Leonid G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lgerchikov@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5814-032X

SHEINERMAN Sergei A.
State Marine Technical University
3 Lotsmanskaya St. St. Petersburg. 190008, Russia
sergei.sheinerman@gmail.com
ORCID: 0000-0003-2650-3741

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГЕРЧИКОВ Леонид Григорьевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lgerchikov@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5814-032X

ШЕЙНЕРМАН Сергей Абрамович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, Санкт-Петербург, Россия.*
190008, Россия, г. Санкт-Петербург, Лоцманская ул., 3
sergei.sheinerman@gmail.com
ORCID: 0000-0003-2650-3741

Received 11.03.2026. Approved after reviewing 13.05.2026. Accepted 13.05.2026.
Статья поступила в редакцию 11.03.2026. Одобрена после рецензирования 13.05.2026. Принята 13.05.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья
УДК 534, 53.072
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19307

УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТА ДОПЛЕРА

Е. В. Гольдберг ✉, Е. Г. Апушкинский, В. А. Кожевников, Л. П. Круковская, Т. А. Тихонова

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

✉ goldberg_ev@spbstu.ru

Аннотация. Представлено описание установки, которая позволяет проводить эксперименты по эффекту Доплера для акустических волн и измерению скорости звука в воздухе. Описание включает принцип работы установки и ее отдельных узлов, а также их основные технические характеристики. Представлены результаты испытаний объекта и их сравнение с расчетными данными (установлено их качественное совпадение). Созданный комплекс применяется в качестве учебной лабораторной установки, а также может применяться как прототип оборудования для измерения скорости воздушного потока. Его можно использовать как для оценки расхода газа, так и для автономного определения либо мониторинга скорости летательного аппарата. Ключевой особенностью системы является возможность работы дистанционно.

Ключевые слова: эффект Доплера, акустические волны, скорость воздушного потока, дистанционный доступ

Для цитирования: Гольдберг Е. В., Апушкинский Е. Г., Кожевников В. А., Круковская Л. П., Тихонова Т. А. Установка для исследования эффекта Доплера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 73–81. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19307

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19307

A SETUP FOR INVESTIGATING THE DOPPLER EFFECT

E. V. Goldberg ✉, E. G. Apushkinskiy, V. A. Kozhevnikov, L. P. Krukovskaya, T. A. Tikhonova

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

✉ goldberg_ev@spbstu.ru

Abstract. This article presents the description of a setup for conducting experiments on the Doppler effect for acoustic waves and measuring the speed of sound in air. The description covers the operation principle of the setup and its individual components as well as their main technical characteristics. The test results and their comparison with calculated data have been presented for this unit. A qualitative match between them was established. This developed system is used as an educational laboratory setup and can also serve as an equipment prototype for measuring the airflow velocity. It can also be used both to estimate gas consumption and to autonomously determine or monitor the aerial vehicle speed. A key feature of the system is the ability to operate remotely.

Keywords: physics, Doppler effect, acoustic waves, air flow velocity, remote access

© Гольдберг Е. В., Апушкинский Е. Г., Кожевников В. А., Круковская Л. П., Тихонова Т. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Goldberg E. V., Apushkinskiy E. G., Kozhevnikov V. A., Krukovskaya L. P., Tikhonova T. A., A setup for investigating the Doppler effect, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 73–81. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19307

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

Введение

Лабораторные занятия – это одна из разновидностей практического обучения студентов, эффективная форма освоения учебного материала, который преподается им на лекциях, семинарах и составляет важную часть учебного процесса. Возрастают требования к модернизации оборудования учебных лабораторий, поскольку молодые специалисты должны нести на свои новые места работы последние научные достижения. При этом важно учитывать возможности дистанционной работы на экспериментальных установках, что на сегодняшний день становится весьма актуальной задачей.

Настоящая публикация посвящена описанию работы по созданию и тестированию экспериментальной установки, сконструированной и созданной на кафедре физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ).

Лабораторная работа состоит в практическом ознакомлении с эффектом Доплера на волнах акустического диапазона и определении скорости звука, который распространяется в воздухе. Аналоги такой лабораторной работы для студентов известны, в частности с применением установки, разработанная фирмой “PHYWE Systems”. Долгое время указанная установка эксплуатировалась и на кафедре физики СПбПУ Петра Великого для обучения студентов; однако, будучи сделанной на базе аналоговых приборов, она окончательно устарела и не позволяла ее использовать как прототип для практических приложений.

Наша работа состояла в глубокой модернизации лабораторной установки как в техническом, так и методическом плане, что позволяет говорить фактически об абсолютно новой системе, которая использует цифровые измерительные приборы, допускает дистанционное управление и позволяет ее применять как для обучения студентов по курсу общей физики и исследовательской работы магистров, так и для практических приложений, которые излагаются далее.

Предварительные сведения

Согласно модели идеального газа, скорость звука в воздухе v_s можно определять по следующей формуле [1]:

$$v_s = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}}, \tag{1}$$

где γ – показатель адиабаты воздуха, $\gamma = 1{,}40$; M – его молярная масса, $M = 29 \cdot 10^{-3}$ кг/моль; T, К, – его температура; R – универсальная газовая постоянная, $R = 8{,}314$ Дж/(К·моль).

Рассчитанное значение скорости звука при конкретной температуре предлагается сравнить со значением, экспериментально найденным при обработке результатов наблюдения эффекта Доплера [1]. Если воспользоваться информацией, приведенной в книге [2] или статье [3], то несложно заключить, что скорость звука v_s связана со скоростью движения приемника звука v_r, его частотой f_0 и частотой f, регистрируемой перемещаемым приемником, соотношением вида

$$v_s = v_r f_0/(f - f_0). \tag{2}$$

Описание установки

В данной работе исследуется эффект Доплера на ультразвуковых волнах. Человеческое ухо не слышит ультразвука, и в этом отношении проведение эксперимента является достаточно комфортным. К другим важным преимуществам ультразвука можно отнести

© Goldberg E. V., Apushkinskiy E. G., Kozhevnikov V. A., Krukovskaya L. P., Tikhonova T. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

пропорциональность доплеровского сдвига частоты $\Delta f = f - f_0$ частоте f_0, и, следовательно, эффект Доплера проявляется сильнее, чем на звуковых частотах.

Блок-схема экспериментальной установки и ее фотография приведены на рис. 1. Установка содержит генератор *1* с функцией измерения частоты и усилитель электрических колебаний ультразвукового диапазона. Генератор работает на фиксированной частоте f_0= 40 кГц. Выходное напряжение генератора, которое можно изменять, подается на неподвижный источник ультразвука *2*. Последний преобразует электрические колебания в акустические. Все приборы, используемые в нашей комплектации установки, являются цифровыми измерительными и снабжены соответствующими сертификатами.

Приемник ультразвука (микрофон *3*) преобразует акустические ультразвуковые колебания, генерируемые источником *2*, в электрические колебания той же частоты. Приемник установлен на каретке, перемещающейся по направляющей. Для надежной работы установки необходимо, чтобы источник и приемник находились на одинаковой высоте и были точно направлены навстречу друг другу. В начале и конце направляющей установлены концевые выключатели, предназначенные для остановки каретки. Каретка с приемником перемещается по направляющей посредством шагового двигателя (устройство, которое преобразует электрические импульсы в механическое вращательное движение, причем каждый импульс поворачивает ротор двигателя на определенное число градусов, составляющих шаг) и зубчатой ременной передачи. Микроконтроллер, расположенный внутри блока управления, осуществляет локальное и дистанционное управление шаговым двигателем.

Электрический сигнал с приемника *3* поступает на усилитель сигнала и далее на измерительный вход генератора *1*. Когда источник и приемник неподвижны, измеряемая частота равна частоте излучателя f_0. Если же приемник движется относительно источника, то измеряемая доплеровская частота f будет определяться формулой (2). Таким образом, один и тот же прибор может измерять как частоту f_0, так и f.

Усилитель *6* и термометр *7* на рис. 1, *b* не видны, так как усилитель скрыт за установкой, а термометр (один на несколько установок) расположен на стене аудитории.

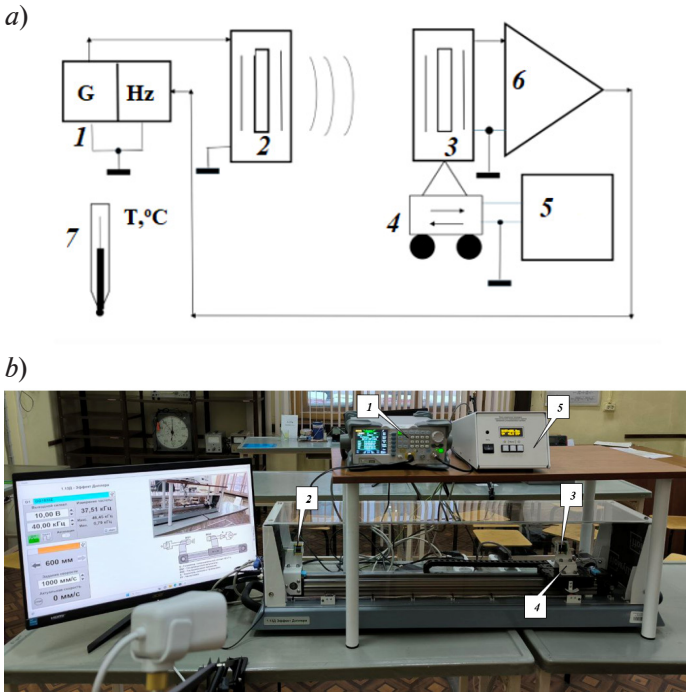


Рис. 1. Блок-схема (*a*) и фотография (*b*) экспериментальной установки:
1 – задающий цифровой генератор (G) с функцией измерения частоты, *2* – неподвижный источник ультразвука, *3* – движущийся приемник ультразвука, *4* – подвижная каретка, *5* – блок управления движением каретки, *6* – усилитель, *7* – термометр (T)

Основные технические характеристики установки следующие:

рабочий ход каретки ..... 600 мм;
рабочая частота приемника/излучателя ..... 40 кГц;
диапазон рабочих скоростей ..... 100 – 1000 мм/с;
габариты установки ..... 1100 × 240 × 275 мм;
масса лабораторной установки ..... около 9 кг;
напряжение и частота питания 220В, 50Гц;
потребляемая мощность ..... не более 100 Вт.

В дистанционном варианте работы к лабораторной установке подключается компьютер (см. рис. 1, *b*) и появляется возможность выполнять лабораторную работу дистанционно, не посещая лабораторию, где расположено оборудование. Студенты должны лишь использовать компьютеры, которые работают в режиме онлайн-конференции, позволяющем удаленно управлять установкой.

Вид рабочего стола персонального компьютера представлен на рис. 2. Панель G1 дублирует реальный генератор с функцией регистрации частоты, а другая панель – блок управления кареткой. В верхнем правом углу транслируется работа экспериментальной установки в режиме реального времени. В нижнем углу показана схема установки.

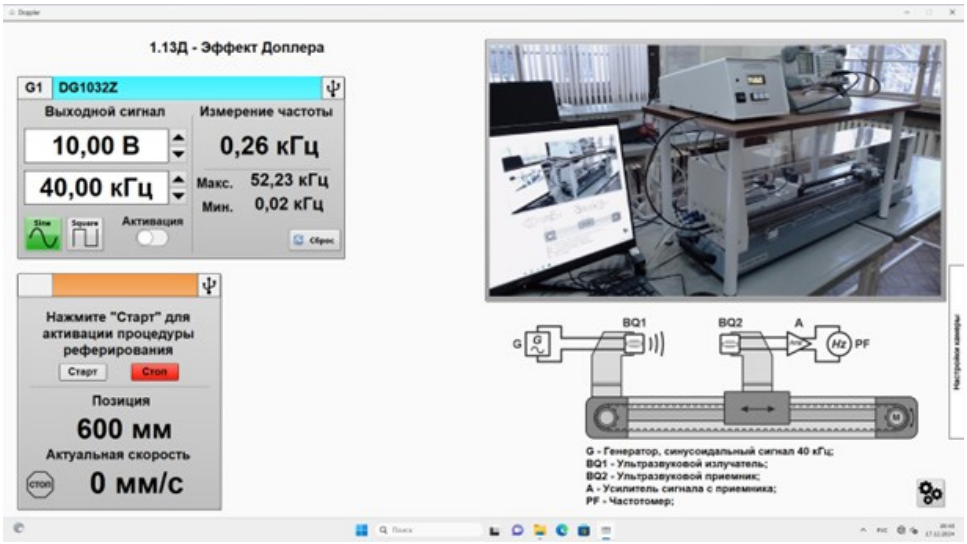


Рис. 2. Общий вид рабочего стола с запущенной программой управления

Результаты испытаний

Установка, на которой были проведены испытания и которая ныне используется для обучения студентов в лаборатории физики и математики СПБПУ, была укомплектована следующими приборами:

генератор сигнала со встроенным частотомером RIGOL DG1032;
моноблок ACER ASPIRE C24-1800;
веб-камера Logitech Full HD StreamCam 1920 × 1080.

Как авторы этой работы, так и студенты в ходе обучения уже неоднократно проводили эксперименты на данной установке, укомплектованной указанными выше приборами, и получали результаты по измерению скорости звука в воздухе с погрешностью, не превышающей таковую для промышленных приборов, а именно

$$v = (345{,}7 \pm 0{,}5)\ \text{м/с при } 25°\text{C}.$$

Расчет по формуле (1) дает значение скорости $v_s = (347 \pm 8)$ м/с. Подобная практика хорошо обучает студентов сравнению результатов, полученных ими путем самостоятельных измерений, с расчетными.

Чтобы исследовать влияние движущихся воздушных потоков на фазовый сдвиг между

излученным и принятым акустическими сигналами, в установку был добавлен осциллограф (в наших экспериментах это марка UTD2102C фирмы UNI-T, Китай) и демонтировались боковые крышки прозрачного короба, чтобы исключать турбулентный поток между приемником и передатчиком ультразвука. Для нагнетания воздуха использовали лабораторную воздуходувку фирмы PHYWE (Германия) с управляемой скоростью воздушного потока (диаметр выходной трубы d = 23 мм).

Практические приложения

Созданная установка дает возможность измерять скорость воздушного потока, обтекающего приемник и передатчик ультразвука, если они неподвижны, а также влияние направления и скорости такого потока на доплеровские сдвиги частот. Это сейчас очень важно и актуально при управлении полетами беспилотной авиации, так как по скорости воздушного потока, обтекающего летящий объект, можно судить о скорости этого объекта. Эта скорость критична для пилотирования, поскольку от нее непосредственно зависят подъемная сила и управляемость БПЛА. Когда источник звука и приемник неподвижны относительно среды, а среда (воздух) движется, это эквивалентно ситуации, когда среда неподвижна, но источник и приемник двигаются в среде. Скорость распространения звуковой волны относительно неподвижного наблюдателя складывается со скоростью движения самой среды (с учетом знака). Скорость движения воздушной массы линейно связана с фазовым сдвигом ультразвукового сигнала, распространяющегося в ней. Эта разность фаз служит прямой и удобной мерой для определения скорости потока, что широко применяется в технике (расходомеры, анемометры). Фазовый сдвиг Δφ (разность между фазами принятого и опорного сигналов) для одного направления следует выражению

$$\Delta\varphi = 2\pi f L(1/v_{eff} - 1/v_s) \approx -(2\pi f L v_{pr})/(v_s)^2, \qquad (3)$$

где $v_{eff} = v_s + v_{pr}$; v_{pr} – проекция скорости ветра на направление распространения сигнала; L – расстояние между приемником и передатчиком. Присвоение знака зависит от направления ветра относительно направления распространения звуковой волны.

Результат оценочного расчета по формуле (3) приведен графически на рис. 3, где также представлена полученная экспериментальная зависимость разности фаз Δφ от скорости воздушного потока, создаваемого отградуированным компрессором в месте нахождения передатчика звукового сигнала. В позиции расположения приемника скорость потока значительно ниже. Наши оценки показали, что скорость падает очень быстро на первых десяти сантиметрах. На расстоянии 0,23 м, равном 10d (d – диаметр выходной трубы компрессора), скорость должна снизиться примерно до 8 – 10 м/с, а на расстоянии 0,6 м она уже составит приблизительно (0,5 – 0,6) м/с. Поэтому полная дистанция между приемником и передатчиком при расчетах была разбита пополам. Начальный участок, составляющий примерно 6d (0,14 м), для которого использовалась формула (3), и основной, который простирался от 0,14 до 0,60 м. На этом участке зависимость скорости потока v_{pr} от расстояния x следовала выражению

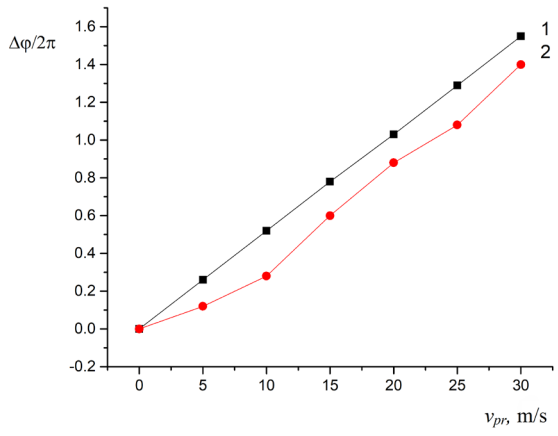


Рис. 3. Экспериментальная (кривая 1) и расчетная (2) зависимости разности фаз Δφ/2π от скорости воздушного потока v_{pr}. Рассчитана по формуле (3)

$$v_{pr} = v_0 kd/x,$$

где v_0 – скорость потока после начального участка, k – числовой коэффициент, k = 0,25.

Обычно скорость v_0 считают примерно в два раза меньше исходной. Экспериментальная зависимость измерена на установке, блок-схема которой представлена на рис. 4. Наблюдается качественное совпадение расчетного и экспериментального графиков. При повторных многократных

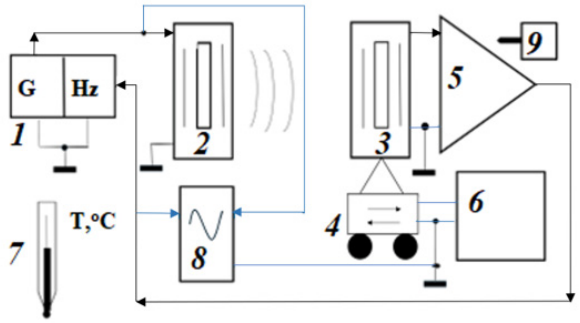


Рис. 4. Блок-схема экспериментальной установки для исследования влияния скорости воздушного потока v_{pr} на разность фаз Δφ: *1* – задающий цифровой генератор с функцией измерения частоты, *2* – неподвижный источник ультразвука, *3* – движущийся приемник ультразвука, *4* – подвижная каретка, *5* – блок управления движением каретки, *6* – усилитель, *7* – термометр, *8* – двухканальный осциллограф, *9* – компрессор

(а значит более аккуратных) экспериментах следует ожидать лучшего совпадения.

Анализ данных на рис. 3 позволяет заключить, что измеряемая разность фаз Δφ прямо пропорциональна скорости движения среды v_{pr} и не зависит от абсолютной скорости звука v_s в первом приближении (хотя v_s в формуле и присутствует, но на практике ее влияние учитывается лишь калибровкой или дополнительными измерениями температуры). Отметим факторы, которые усложняют корректное определение скорости потока через фазовый сдвиг в реальных условиях.

Температура. Скорость звука сильно зависит от температуры воздуха. Это влияет на величину фазового сдвига. В современных приборах температуру измеряют для учета этого эффекта.

Турбулентность и неоднородность потока. Ветер характеризуется неоднородным движением. Пульсации скорости и вихри вызывают случайные колебания фазы (акустический «шум»), которые необходимо усреднять во времени.

Поперечная составляющая ветра. В классической двухлучевой системе на результат измерения влияет только проекция скорости ветра на ось между датчиками. Чтобы измерять полный вектор скорости ветра, используют трехлучевые анемометры.

Диссипация и рассеяние. На больших расстояниях высокочастотный ультразвук затухает и рассеивается, что может ослабить сигнал и ухудшить точность измерения фазы.

В итоге получается, что скорость движения воздушной массы линейно зависит от фазового сдвига ультразвукового сигнала, в ней распространяющегося. Однако в чистом виде измерить этот сдвиг с высокой точностью затруднительно. Поэтому на практике используется встречно-параллельная схема измерения, которая преобразует влияние скорости в разность фаз между двумя встречными сигналами. Эта разность фаз является прямой и удобной для измерения мерой скорости потока, что широко применяется в технике (расходомеры, анемометры).

Очень интересной и весьма сложной оказывается проблема измерения и интерпретации доплеровских сдвигов частот при распространении акустических волн в движущихся средах, которые перемещаются под углом по отношению к движению источника или приемника волн [4 – 6]. Данная задача является актуальной, и поэтому установка, которая представлена в этой статье, может использоваться не только для решения учебных, но и научно-технических задач. Отдельный интерес вызывают аспекты применения эффекта Доплера для решения практических и инженерных задач в газах и жидкостях. Например, это задачи, связанные с подводными объектами, между которыми осуществляется связь на акустических волнах [7], или определение местоположения и характеристик движения воздушного судна посредством пассивной локации за счет регистрации акустического сигнала с нескольких точек [8]. Иногда возникает задача «очистить» звук от эффекта Доплера; в статье [9] обсуждается, как подойти к решению этой проблемы.

Заключение

Установка, описанная в этой статье, создана и широко используется в учебной лаборатории физики и математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого для проведения занятий со студентами и их самостоятельной научной работы. Учебная лабораторная работа рассчитана на два академических часа при работе двух студентов за одной установкой в лаборатории под наблюдением преподавателя. В дистанционном режиме в лаборатории должен находиться сотрудник, включающий и

выключающий установку. Снятие показаний с приборов студенты осуществляют, руководствуясь учебным пособием [1], а обработку результатов ведут в соответствии с методическими указаниями в работе [10].

Примеры приложений, которые можно проверять и реализовывать с использованием данной установки, связаны с определением скорости воздушного потока, обтекающего установку, что можно применять как для оценки расхода газа, так и для автономного определения и мониторинга скорости летательного аппарата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Апушкинский Е. Г., Быков Н. Ю., Воробьева Т. В. и др.** Физика. Молекулярная физика. Санкт-Петербург: Политех-Пресс», 2025. 82 с.

2. **Иродов И. Е.** Волновые процессы. Основные законы. М.: БИНОМ. Лабораторные знания, 2007. 263 с.

3. **Neipp C., Hernández A., Rodes J.J., Marquez A., Beléndez T., Beléndez A.** An analysis of the classical Doppler effect // European Journal of Physics. 2003. Vol. 24. No. 5. P. 497.

4. **Богушевич А. Я.** К анализу акустического эффекта Доплера в трехмерно неоднородной движущейся среде // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12. № 4. С. 314–320.

5. **Хазиев И. Л., Устинова Е. С., Глущенко А. Г., Глущенко Е. П.** Эффект Доплера в неравномерно движущихся структурах // Современные наукоемкие технологии. 2014. № 5. Часть 2. С. 125–128.

6. **Гейстер С. Р., Гладышев А. М., Гейстер А. С., Джеки А. М.** Доплеровский эффект при акустическом мониторинге движущихся автотранспортных средств // Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники (БГУИР). 2010. № 1 (47). С. 5–11.

7. **Ahmad A. M., Kassem J., Barbeau M., Kranakis E., Porretta S., Garcia-Alfaro J.** Doppler effect in the acoustic ultralow frequency band for wireless underwater networks // Mobile Networks and Applications. 2018. Vol. 23. No. 5. Pp. 1282–1292.

8. **Martin S. R., Genescá M., Romeu J., Pámies T.** Aircraft tracking by means of the acoustical Doppler effect // Aerospace Science and Technology. 2013. Vol. 28. No. 1. Pp. 305–314.

9. **Iwaya Y., Suzuki Y.** Rendering moving sound with the Doppler effect in sound space // Applied Acoustics. 2007. Vol. 68. No. 8. Pp. 916–922.

10. **Агапьев Б. Д., Козловский В. В.** Физика. Практическая обработка экспериментальных данных: методические указания. Санкт-Петербург: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. 61 с.

REFERENCES

1. **Apushkinskiy E. G., Bykov N. Yu., Vorobyeva T. V., et al.,** Fizika. Molekulyarnaya fizika [Physics. Molecular physics: Practical workshop], Politekh-Press Publishing, St. Petersburg, 2025 (in Russian).

2. **Irodov I. E.,** Basic laws of electromagnetism. Translated from Russian, Mir Publishers, Moscow, 1986.

3. **Neipp C., Hernández A., Rodes J. J., et al.,** An analysis of the classical Doppler effect, Eur. J. Phys. 24 (5) (2003) 497.

4. **Bogushevich A. Ya.,** Ultrasonic methods for estimation of atmospheric meteorological and turbulence parameters, Atmos. Ocean. Opt. 12 (02) (1999) 164–169.

5. **Khaziev I. L., Ustinova E. S., Glushchenko A. G., Glushchenko E. P.,** Effect Doplera v neravnomerno dvizhushchikhcya strukturakh [The Doppler effect in non-uniformly moving structures], Modern High Technologies. (5-2) (2014) 126–128 (in Russian).

6. **Heister S. R., Gladyshev A. M., Heister A. S., Jackie A. M.,** Doppler effect at acoustic monitoring of moving vehicles, Doklady BGUIR [Reports from Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics]. (1(47)) (2010) 5–11 (in Russian).

7. **Ahmad A. M., Kassem J., Barbeau M., et al.,** Doppler effect in the acoustic ultralow frequency band for wireless underwater networks, Mobile Netw. Appl. 23 (5) (2018) 1282–1292.

8. **Martin S. R., Genescá M., Romeu J., Pámies T.,** Aircraft tracking by means of the acoustical Doppler effect, Aerosp. Sci. Technol. 28 (1) (2013) 305–314.

9. **Iwaya Y., Suzuki Y.,** Rendering moving sound with the Doppler effect in sound space, Appl. Acoust. 68 (8) (2007) 916–922.

10. **Agapyev B. D., Kozlovskiy V. V.,** Fizika. Prakticheskaya obrabotka eksperimentalnykh dannykh: metodicheskiye ukazaniya [Physics. Practical processing of experimental data: Methodological guidelines], Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg, 2012 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛЬДБЕРГ Екатерина Владимировна – *заведующая учебной лабораторией физики и математики кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
goldberg_ev@spbstu.ru
ORCID: 0009-0007-7590-3908

АПУШКИНСКИЙ Евгений Геннадиевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
apushkinsky@hotmail.com
ORCID: 0000-0003-0294-3355

КОЖЕВНИКОВ Вадим Андреевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
moraval@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5986-0820

КРУКОВСКАЯ Лидия Петровна – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lidia.ks@mail.ru

ТИХОНОВА Татьяна Анатольевна – *ассистент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
tihonova_ta@spbstu.ru
ORCID: 0009-0005-9096-3744

THE AUTHORS

GOLDBERG Ekaterina V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
goldberg_ev@spbstu.ru
ORCID: 0009-0007-7590-3908

APUSHKINSKIY Evgeniy G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
apushkinsky@hotmail.com
ORCID: 0000-0003-0294-3355

KOZHEVNIKOV Vadim A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
moraval@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5986-0820

KRUKOVSKAYA Lidia P.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lidia.ks@mail.ru

TIKHONOVA Tatiana A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
tihonova_ta@spbstu.ru
ORCID: 0009-0005-9096-3744

Статья поступила в редакцию 12.02.2026. Одобрена после рецензирования 14.04.2026. Принята 14.04.2026.
Received 12.02.2026. Approved after reviewing 14.04.2026. Accepted 14.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Физическая электроника

Обзорная статья
УДК 621.362
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19308

СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛУГЕЙСЛЕРОВЫХ СПЛАВОВ В ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ГЕНЕРАТОРАХ ДЛЯ НИЗКИХ И СРЕДНИХ ТЕМПЕРАТУР

В. Т. А. Нгуен [1] ✉, А. В. Архипов [1], Т. Л. З. Дао [2], Х. З. Нгуен [3], Х. И. Нгуен [3], В. Д. Лыонг [3], М. Т. Нгуен [4], Н. А. Архипов [1], Х. Сунь [1], О. И. Лукша [1], П. Г. Габдуллин [1]

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

[2] Университет Тоямы, г. Тояма, Япония;

[3] Вьетнамская академия наук и технологий, г. Ханой, Социалистическая Республика Вьетнам;

[4] Институт технологии, г. Ханой, Социалистическая Республика Вьетнам

✉ anh.spbpu@gmail.com

Аннотация. Обзор посвящен полугейслеровым сплавам MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), представляющим особый интерес для создания тонкопленочных термоэлектрических генераторов, работающих в низко- и среднетемпературном диапазонах (300 − 800 K). В работе рассматриваются современные проблемы в сфере энергетики, требующие развития компактных и эффективных термоэлектрических генераторов (ТЭГ), а также причины возросшего внимания к полугейслеровым сплавам, по сравнению с традиционными материалами на основе висмута и теллура. Детально обсуждаются кристаллическая структура, фазовая стабильность, электронные и фононные свойства сплавов, методы их синтеза и стратегии легирования. Представлен анализ результатов новейших работ по тонкопленочным соединениям MNiSn и оценивается их потенциал в архитектуре гибких ТЭГ, открывающих новые направления для высокоэффективных миниатюрных энергетических устройств.

Ключевые слова: тонкая пленка, полугейслеров сплав, тонкопленочный термоэлектрический генератор, термоэлектрические свойства

Финансирование: Исследование финансируется в рамках Программы прикладных исследований и развития технологий в области материалов (грант № KC.02.06/21−30) Министерства науки и технологий Социалистической Республики Вьетнам.

Для цитирования: Нгуен В. Т. А., Архипов А. В., Дао Т. Л. З., Нгуен Х. З., Нгуен Х. И., Лыонг В. Д., Нгуен М. Т., Архипов Н. А., Сунь Х., Лукша О. И., Габдуллин П. Г. Свойства и применение полугейслеровых сплавов в тонкопленочных термоэлектрических генераторах для низких и средних температур // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 82−115. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19308

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

© Нгуен В. Т. А., Архипов А. В., Дао Т. Л. З., Нгуен Х. З., Нгуен Х. И., Лыонг В. Д., Нгуен М. Т., Архипов Н. А., Сунь Х., Лукша О. И., Габдуллин П. Г., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Review article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19308

PROPERTIES AND APPLICATIONS OF THE HALF-HEUSLER ALLOYS IN THIN-FILM THERMOELECTRIC GENERATORS FOR LOW AND MEDIUM TEMPERATURES

V. T. A. Nguyen [1] ✉, A. V. Arkhipov [1], T. L. D. Dao [2], H. D. Nguyen [3], H. Y. Nguyen [3], V. D. Luong [3], M. T. Nguyen [4], N. A. Arkhipov [1], H. Sun [1], O. I. Louksha [1], P. G. Gabdullin [1]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;
[2] University of Toyama, Toyama, Japan;
[3] Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Socialist Republic of Vietnam;
[4] Institute of Technology, Hanoi, Socialist Republic of Vietnam
✉ anh.spbpu@gmail.com

Abstract. This review focuses on the half-Heusler MNiSn alloys (M = Ti, Zr, Hf), which are of particular interest for creation of thin-film thermoelectric generators (TEGs) operating in the low- and medium-temperature ranges (300 − 800 K). The paper examines current energy challenges requiring the development of compact and efficient TEGs, as well as the reasons for the increased attention paid to the half-Heusler alloys compared to traditional Bi-, Te-based materials. The crystal structure, phase stability, electronic and phononic properties of the alloys, synthesis methods, and alloying strategies are discussed in detail. The results of recent studies on thin-film MNiSn are analyzed, and their potential for flexible TEG architecture, opening new avenues for highly efficient miniature energy devices, is assessed.

Keywords: thin film, half-Heusler alloy, thin-film thermoelectric generator, thermoelectric properties

Funding: The reported study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Technology of Vietnam within the framework of "The Program of Applied Research and Technology in the Field of Materials" (Grant No. KS.02.06/21−30).

For citation: Nguyen V. T. A., Arkhipov A. V., Dao T. L. D., Nguyen H. D., Nguyen H. Y., Luong V. D., Nguyen M. T., Arkhipov N. A., Sun H., Louksha O. I., Gabdullin P. G., Properties and applications of the half-Heusler alloys in thin-film thermoelectric generators for low and medium temperatures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 82−115. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19308

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

Введение

Более половины мировых энергоресурсов теряется в виде отходящего тепла, выделяемого промышленными предприятиями и транспортными системами, что приводит к значительным энергетическим потерям и росту выбросов парниковых газов [1 − 7]. Термоэлектрические генераторы (ТЭГ) представляют собой твердотельное решение для утилизации этого тепла за счет прямого преобразования тепловой энергии в электрическую без подвижных частей, обеспечивая высокую надежность и отсутствие локальных выбросов загрязняющих веществ [8 − 12]. Недавние достижения в области производственных технологий открыли широкие возможности для применения ТЭГ:

рекуперация тепла на промышленных предприятиях [13 − 15], в автомобильных системах [16, 17];

интеграция ТЭГ в строительные конструкции [18, 19];

использование в носимой электронике для сбора тепла от электронных компонентов и микросхем [20 − 23] либо тепла человеческого тела для питания маломощных устройств [9, 24 − 30];

© Nguyen V. T. A., Arkhipov A. V., Dao T. L. D., Nguyen H. D., Nguyen H. Y., Luong V. D., Nguyen M. T., Arkhipov N. A., Sun H., Louksha O. I., Gabdullin P. G., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

обеспечение энергией жизненно важных медицинских имплантатов, включая кардиостимуляторы [31], инсулиновые помпы [32], нейростимуляторы [33, 34] и биосенсоры [9, 28, 35 – 38];

применение радиоизотопных термоэлектрических генераторов (РТГ) в космических миссиях [39, 40].

Параллельно с этим развитие высокоэффективных термоэлектрических материалов и, прежде всего, полугейслеровых сплавов, существенно повысило термоэлектрическую добротность ZT и плотность мощности (или фактор мощности PF) ТЭГ-устройств, расширив спектр их потенциальных применений [41 – 43].

Полугейслеровы сплавы (тройные интерметаллические соединения с общей формулой XYZ) рассматриваются как одни из наиболее перспективных термоэлектрических материалов для рекуперации отходящего тепла в низко- и среднетемпературном диапазонах благодаря оптимальному сочетанию термоэлектрических характеристик, механической прочности и термической стабильности [25, 27]. В частности, сплавы состава MNiSn (M = Ti, Zr, Hf и др.), такие как TiNiSn [44], ZrNiSn [45], ZrTiNiSn [46], демонстрируют химическую устойчивость вплоть до ~800 K и состоят из доступных и нетоксичных элементов (Ti, Zr, Ni, Sn) [47], что делает их более экологичной альтернативой традиционным термоэлектрикам на основе теллурида висмута BiTe.

В совокупности изучение тонких пленок на основе полугейслеровых сплавов MNiSn представляет собой актуальное научное направление на стыке материаловедения и энергосбережения. Эти материалы сочетают в себе высокие термоэлектрические характеристики в температурном диапазоне 300 – 800 K, устойчивость и совместимость с масштабируемыми методами получения при использовании относительно доступных элементов. Легирование ванадием и другими элементами, целенаправленно вводимыми в состав полугейслеровых сплавов, наряду с приемами наноструктурирования, в частности формированием сверхрешеток и нанозернистых тонкопленочных архитектур, сегодня рассматривается как один из наиболее действенных путей повышения их термоэлектрической эффективности. Именно за счет такого комплексного воздействия на состав и структуру тонкопленочные материалы на основе полугейслеровых соединений оказываются способны в определенном температурном интервале достигать высоких значений безразмерной добротности ZT. Не случайно с этим связывают и перспективы их практического применения: речь идет как об утилизации низко- и среднепотенциального тепла в промышленности, энергетике и автомобильной технике, так и о создании автономных источников питания для носимых и имплантируемых устройств, работающих за счет тепла человеческого тела.

Цель настоящего обзора состоит в систематизации современных представлений о материалах на основе полугейслеровых сплавов MNiSn.

Особое внимание уделено их фундаментальным физическим особенностям, методам синтеза тонких пленок, структурным и термоэлектрическим характеристикам, а также последним достижениям в данной области. Кроме того, рассмотрены ключевые направления дальнейших исследований, связанные с повышением эффективности, стабильности и эксплуатационной надежности таких материалов для их практического применения в термоэлектрических устройствах различного назначения.

Общие тенденции в характеристике полугейслеровых сплавов MNiSn

Полугейслеровы (half-Heusler) сплавы MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), несомненно, представляют значительный интерес благодаря сочетанию структурной стабильности, регулируемой электронной структуры и перспективам термоэлектрических применений. В данном разделе рассматриваются их фундаментальные свойства, методы синтеза и подходы к легированию, определяющие эффективность материалов.

Кристаллическая структура и атомная конфигурация. Соединения MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) кристаллизуются в структуре типа MgAgAs – модификации полугейслеровых сплавов, принадлежащей кубической пространственной группе $F\bar{4}3m$ (№ 216 в международной таблице кристаллографии) (рис. 1) из базы SpringerMaterials (2022). Эта структура может рассматриваться как три взаимопроникающих подрешетки типа гранецентрированной кубической, где атомы M, Ni и Sn занимают положения 4*a* (0, 0, 0), 4*c* (¼, ¼, ¼) и

4*b* (½, ½, ½) соответственно, в то время как позиция 4*d* (¾, ¾, ¾) остается вакантной [48]. Подобная атомная организация часто интерпретируется как каркас Ni–Sn, аналогичный структуре цинкбленда, «заполненный» электроположительными атомами M, что создает прочную ковалентно-ионную связь и обеспечивает высокую механическую и термическую стабильность кубической решетки по данным Materials Project (2020).

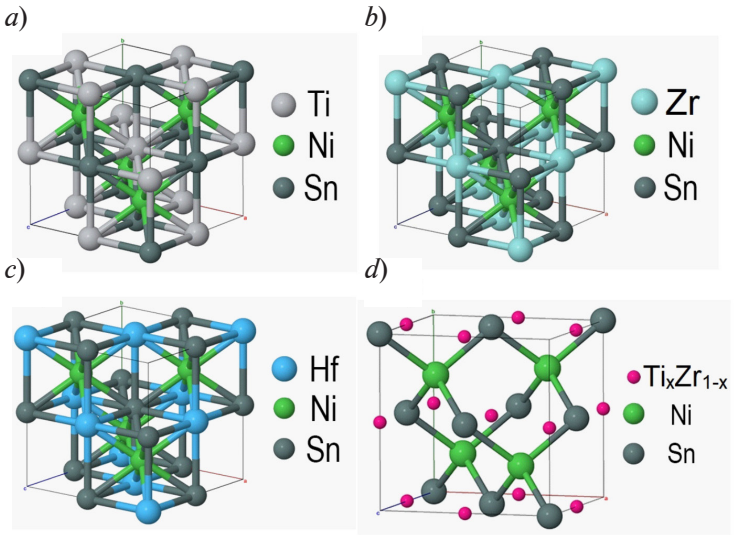


Рис. 1. Кристаллические структуры по данным Materials Project (2020) полугейслеровых сплавов в кубической фазе типа MgAgAs ($F\bar{4}3m$): *a* – TiNiSn, *b* – ZrNiSn, *c* – HfNiSn, *d* – $Ti_xZr_{1-x}NiSn$. Указаны позиции и координации атомов M (Ti, Zr, Hf), а также Ni и Sn

Структура полугейслеровых сплавов представляет собой тернарное производное фазы полного гейслера M_2NiSn, в которой одна из подрешеток M остается пустой. Такое структурное упорядочение соответствует правилу 18 электронов (это эмпирическое химическое правило, используемое для предсказания формул стабильных комплексов переходных металлов), что обусловливает полупроводниковый характер соединений MNiSn и определяет их высокий потенциал в качестве термоэлектрических материалов [49 – 51]. Координационные окружения атомов M, Ni и Sn в этих соединениях остаются аналогичными при переходе от Ti к Zr и Hf, что подтверждает их изоструктурность и возможность образования твердых растворов $Ti_xZr_{1-x}NiSn$ без изменения основной симметрии решетки [48].

Каждый атом металла M (Ti, Zr или Hf) в структуре MNiSn имеет координационное число 10, связываясь при этом с четырьмя эквивалентными атомами никеля и шестью эквивалентными атомами олова. Атом никеля Ni, в свою очередь, окружен четырьмя атомами M и четырьмя атомами олова Sn, что можно представить как структуру, аналогичную объемноцентрированной кубической ячейке для ближайших соседей. Атом Sn имеет координационное число 10, связываясь с шестью атомами M и четырьмя атомами Ni по данным Materials Project. Значения длины связи и параметра решетки несущественно меняются с изменением атомного радиуса металла M (табл. 1). Соединение TiNiSn характеризуется длинами связей Ti–Ni и Ti–Sn, равными 2,56 и 2,95 Å, соответственно; ZrNiSn – длинами связей Zr–Ni и Zr–Sn, равными 2,65 и 3,06 Å, соответственно; а в соединении HfNiSn расстояния между атомами *L* следующие: $L_{Hf–Ni} = 2{,}63$ Å, $L_{Hf–Sn} = 3{,}03$ Å по данным Materials Project. Все три соединения изоструктурны и сохраняют одинаковую кубическую симметрию и локальную координационную геометрию. Эти незначительные изменения длины связей отражают расширение решетки с увеличением размера атома M, что согласуется с законом Вегарда для твердых растворов $Ti_xZr_{1-x}NiSn$ [50].

Важно отметить, что увеличение содержания циркония (легирование цирконием) в соединении TiNiSn способствует повышению его структурной стабильности, что подтверждается значениями энергии образования ΔE (эВ/ат.), представленными на рис. 2, *a*.

Таблица 1

Значения структурных параметров соединений MNiSn (M = Ti, Zr, Hf)

Параметр	Значение для соединения		
	TiNiSn	ZrNiSn	HfNiSn
a, Å	5,94 [52 – 54]	6,11 [52 – 54]	6,08 [52 – 54]
L, Å M–Ni M–Sn	2,56 (Materials Project)	2,65 (Materials Project)	2,63 (Materials Project)
E_g, эВ	2,95 (Materials Project)	3,06 (Materials Project)	3,03 (Materials Project)
ΔE, эВ/ат.	0,44 – 0,45 [54]	0,49 – 0,50 [54]	0,36 – 0,39 [54]
ρ, г/см^3	–0,592 (Materials Project)	–0,712 (JARVIS-DFT, JVASP-1091)	–0,631 (Materials Project)

Обозначения: a – параметр кубической решетки; L – длина химической связи, E_g – ширина запрещенной зоны, ΔE – энергия образования соединения, ρ – его плотность.

Схожие значения (от 550 до 750 мэВ) и тенденции в изменении энергии при переходе от TiNiSn к ZrNiSn ранее были представлены в работе [55].

Увеличение параметра решетки и плотности в ряду соединений (рис. 2, *b*, *c*) объясняется бóльшими размерами и массой атомов циркония Zr, по сравнению с этими параметрами для атомов титана Ti.

Следует также отметить, что цирконий и титан образуют почти изоморфную систему, что подтверждается их бинарной диаграммой состояния [56]. Такое поведение обусловлено выраженным кристаллографическим сходством этих элементов, которые могут существовать как в гексагональной плотноупакованной (α), так и в объемноцентрированной кубической (β) модификациях. Сравнимые атомные радиусы (147 пм против 160 пм), близкие электроотрицательности (около 1,54 и 1,33) и одинаковые валентные состояния (+4) способствуют изоморфному замещению. Ввиду этого обстоятельства наблюдаются минимальные искажения кристаллической решетки, высокая структурная устойчивость и постепенное увеличение параметра решетки при повышении в соединении содержания циркония.

Взаимодействия атомов в этих соединениях сочетают металлический, ковалентный и ионный типы химической связи. Ковалентная составляющая химической связи в полугейслеровых соединениях MNiSn в значительной степени определяется сетью взаимодействий Ni–Sn, формирующейся за счет гибридизации 3*d*-орбиталей Ni и 5*p*-орбиталей Sn. В то же время связи M–Ni и M–Sn имеют смешанный, частично ионный характер, обусловленный переносом электронной плотности от более электроположительных атомов M к подрешетке Ni–Sn [57]. Сочетание ковалентного и ионного вкладов в химическую связь обусловливает высокую механическую прочность и термическую устойчивость полугейслеровых сплавов, позволяя им сохранять кристаллическую структуру при температурах выше 1000 K без фазового разложения [58]. Наличие вакантной позиции 4*d* в кристаллической решетке дополнительно повышает структурную гибкость этих соединений и облегчает как замещающее легирование, так и интерстициальную модификацию без существенного нарушения исходной симметрии полугейслеровой фазы.

Изоструктурность TiNiSn и ZrNiSn, а также близость их кристаллографических параметров способствуют формированию непрерывных твердых растворов $Ti_xZr_{1-x}NiSn$, сохраняющих структуру полугейслерового типа во всем рассматриваемом диапазоне составов. Эта особенность играет решающую роль в фазовой стабильности и термоэлектрической оптимизации; она обсуждается в следующем подразделе.

Фазовая стабильность. Фазовые диаграммы Ti–Ni–Sn, Zr–Ni–Sn, Hf–Ni–Sn и их обобщенная система Ti–Zr–Ni–Sn [51, 59, 60] при температуре 300 K (рис. 3) указывают

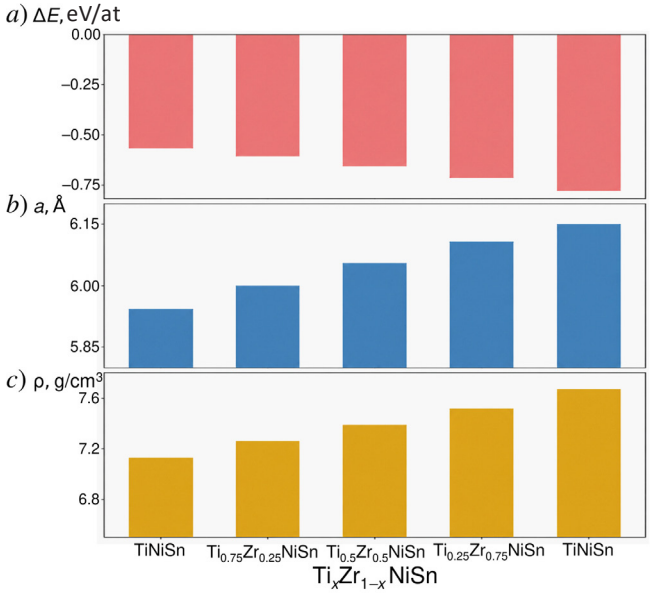


Рис. 2. Энергетические и структурные характеристики полугейслерового сплава $Ti_xZr_{1-x}NiSn$, представленные столбчатыми диаграммами для параметров: энергия образования ΔE (*a*), постоянная решетки *a* (*b*) и плотность материала ρ (*c*)

на расположение полупроводниковых фаз TiNiSn, ZrNiSn и HfNiSn на оболочке устойчивости (convex hull) системы [61, 62].

Фазовая стабильность соединений MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) играет ключевую роль в обеспечении высоких эксплуатационных характеристик полупроводниковых термоэлектрических материалов типа half-Heusler. Фазы TiNiSn, ZrNiSn, HfNiSn и $Ti_xZr_{1-x}NiSn$ [51, 59, 60] являются термодинамически устойчивыми при 300 K, располагаясь на оболочке устойчивости диаграммы образования (см. рис. 3). Это означает, что их энергия образования минимальна и энергия над оболочкой равна нулю (E_{hull} = 0), т.е. у данных фаз нет более низкоэнергетических конкурентов из соединений Ni–Sn или M–Sn (где M = Ti, Zr, Hf). Такое положение на оболочке устойчивости, вместе со сходством кристаллохимической

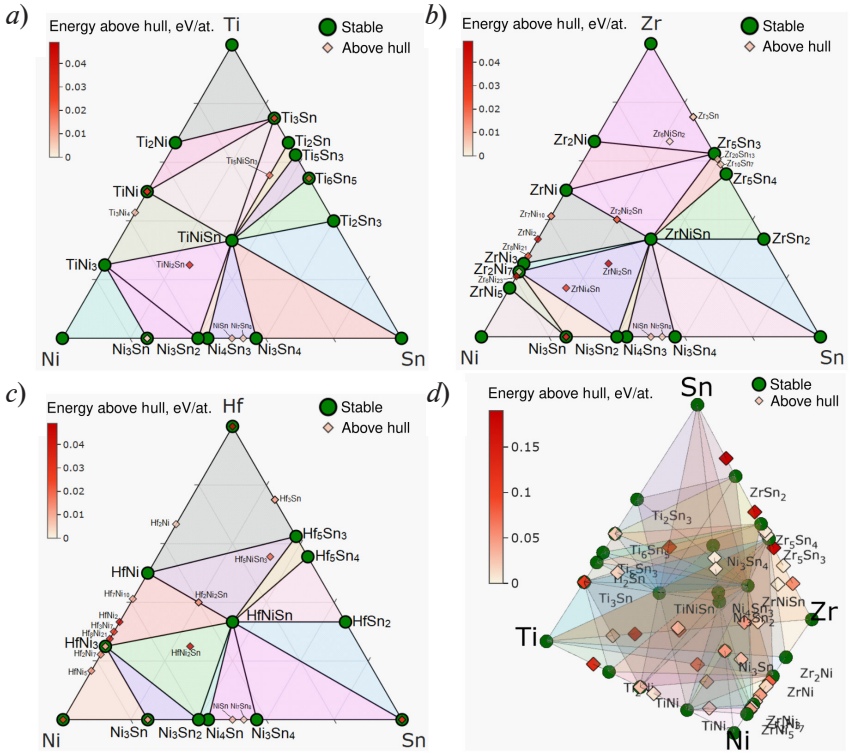


Рис. 3. Расчетные фазовые диаграммы систем Ti–Ni–Sn (*a*), Zr–Ni–Sn (*b*), Hf–Ni–Sn (*c*) и Ti– Zr–Ni–Sn (*d*) при 300 K, полученные по данным Materials Project (2020) [51, 59, 60]

структуры и близкими атомными радиусами Ti и Zr, обеспечивают образование полного твердого раствора $Ti_xZr_{1-x}NiSn$ при любых значениях x. Согласно данным фазовых диаграмм, в системе отсутствуют более энергетически выгодные фазы, способные инициировать разложение полугейслерных соединений: не обнаружено ни перитектоидных, ни эвтектических превращений с более низкой свободной энергией [61, 62]. Благодаря химическому и кристаллографическому сходству компонентов твердые растворы (Ti,Zr)NiSn сохраняют кубическую структуру типа MgAgAs (пространственная группа $F\bar{4}3m$) во всем диапазоне соотношений Ti/Zr, что обеспечивает их высокую фазовую устойчивость, в том числе в тонкопленочном состоянии.

Экспериментальные исследования также подтверждают высокую термическую стабильность полугейслеровых фаз системы (Ti,Zr)NiSn. Так, для TiNiSn начало разложения полугейслеровой фазы наблюдается при температуре около 1453 K [63], тогда как ZrNiSn сохраняет структурную стабильность вплоть до температуры плавления, составляющей приблизительно 1708 – 1760 K [63]. Кроме того, полугейслеровы соединения, обогащенные Zr и Hf, характеризуются повышенной стойкостью к окислению и сохраняют свою структуру до температур порядка 600 – 800 K, тогда как Ti-обогащенные составы начинают деградировать уже при температуре около 673 K [64]. Таким образом, соединение $Ti_xZr_{1-x}NiSn$ обладает способностью функционировать в диапазоне от комнатной температуры (RT) до сотен градусов Цельсия без фазового распада. На практике это означает устойчивость тонких пленок этих полугейслеровых сплавов при низких и средних температурах эксплуатации.

Электронная структура. Для исследуемых полугейслеровых сплавов электронная структура играет ключевую роль, в том числе для понимания природы их термоэлектрических свойств и механизмов переноса носителей заряда. Оптимизированные в настоящей работе значения параметров решетки хорошо согласуются с экспериментальными данными, обобщенными в табл. 1. Полосы, формирующие максимум валентной зоны (*англ.* Valence Band Maximum (VBM)), были пронумерованы в порядке возрастания их энергии вокруг точки Γ (VBM1, VBM2 и VBM3), а рассчитанные значения эффективных масс носителей (табл. 2) указаны в единицах массы свободного электрона m_0. Легкие дырки в плоской зоне VBM1 способствуют повышению термоэдс (коэффициента Зеебека S), тогда как тяжелые дырки в более дисперсионных зонах VBM2 и VBM3 определяют основную проводимость σ соединений.

Таблица 2

Значения эффективной массы носителей в соединениях MNiSn вдоль различных кристаллографических направлений [65]

Полоса	Кристаллографическое направление	Эффективная масса носителей (в ед. m_0)		
		TiNiSn	ZrNiSn	HfNiSn
VBM1	Γ ↔ L	0,39	0,25	0,22
	Γ ↔ X	0,64	0,40	0,38
VBM2, VBM3	Γ ↔ L	3,72	2,44	2,11
VBM2, VBM3	Γ ↔ X	1,30	0,88	0,71
CBM	X ↔ Γ	2,89	3,23	3,14
	X ↔ W	0,56	0,38	0,36

Обозначения: VBM – максимум валентной зоны, CBM – минимум зоны проводимости.

На рис. 4 представлено распределение зон, из которого следует, что соединения во всех случаях характеризуются непрямой запрещенной зоной с тройным вырожденным максимумом валентной зоны (*англ.* Valence Band Maximum (VBM)) в точке Γ и минимумом зоны проводимости (*англ.* Conduction Band Minimum (CBM)) в точке X.

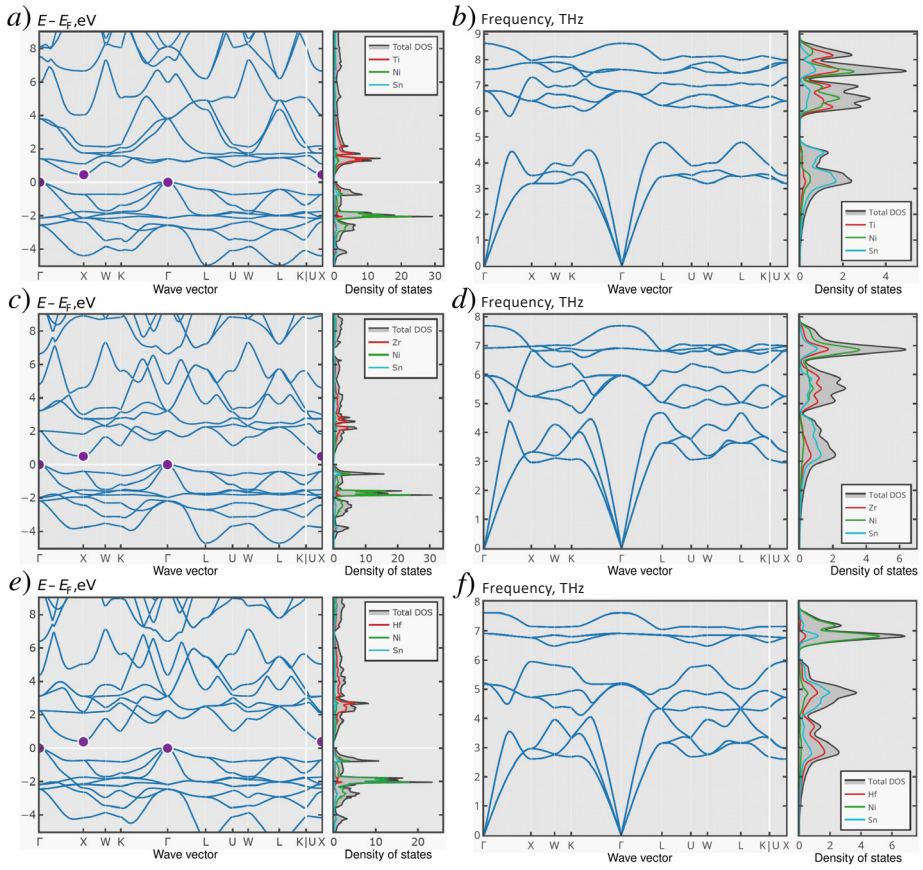


Рис. 4. Электронная зонная структура и фононные дисперсионные кривые соединений TiNiSn (*a*, *b*), ZrNiSn (*c*, *d*) и HfNiSn (*e*, *f*), полученные по данным Materials Project (2020)

Дисперсия фононов. Три графика (см. рис. 4, *b*, *d*, *f*) показывают фононные спектры и плотность фононных состояний (PDOS) полугейслеровых сплавов TiNiSn, ZrNiSn и HfNiSn. Во всех трех полугейслеровых системах отсутствуют отрицательные частоты, что свидетельствует об их динамической стабильности. Каждое соединение имеет 9 фононных ветвей (3 акустические и 6 оптических), соответствующих трем атомам в элементарной ячейке.

Максимальная фононная частота ω понижается при увеличении массы элемента M:

~8,7 THz (TiNiSn), ~7,8 THz (ZrNiSn) и ~7,6 THz (HfNiSn).

Это согласуется со следующей зависимостью:

$$\omega \propto \sqrt{\frac{k}{m}}, \tag{1}$$

где k – константа упругости; m – масса атома [66].

Решеточная теплопроводность k_L описывается кинетическим выражением:

$$k_L \propto v_g^2 \tau C_v, \tag{2}$$

где τ – время релаксации; C_v – теплоемкость; $v_g = \partial\omega/\partial k$ – групповая скорость фононов [67].

Таким образом, решеточная теплопроводность уменьшается в ряду

$$k_L(\text{TiNiSn}) > k_L(\text{ZrNiSn}) > k_L(\text{HfNiSn}),$$

что указывает на потенциал этих материалов в снижении решеточной теплопроводности.

Методы синтеза полугейслеровых сплавов

Тонкопленочные материалы, применяемые в современных исследованиях, преимущественно получают методами физического осаждения из паровой фазы (*англ.* Physical Vapor Deposition (PVD)). Синтез осуществляется в вакууме, где твердое вещество переходит в паровую фазу, транспортируется к подложке и конденсируется в виде тонкой пленки. К наиболее распространенным техникам PVD относятся молекулярно-пучковая эпитаксия (*англ.* Molecular Beam Epitaxy (MBE)), магнетронное распыление (*англ.* Magnetron Sputtering (MS)) и импульсное лазерное осаждение (*англ.* Pulsed Laser Deposition (PLD)). Метод MBE известен способностью формировать пленки высокого качества, особенно для полупроводниковых систем кремния Si и A^3B^5, однако требует сложного технологического обеспечения и условий ультравысокого вакуума [68]; в связи с ограничениями объема обзора описание MBE выходит за рамки настоящей работы, и он не будет здесь рассматриваться подробнее. PLD характеризуется высокой гибкостью при осаждении многокомпонентных соединений и точным контролем стехиометрии [69], тогда как для металлических пленок нередко предпочтение отдается технике MS вследствие меньшего количества микрокапель в осажденном слое [69].

Импульсное лазерное осаждение. Импульсное лазерное осаждение (PLD) (рис. 5), известное также как лазерное осаждение, или лазерная эпитаксия в ранних исследованиях [70, 71], представляет собой один из наиболее универсальных и гибких методов получения тонких пленок. Одним из основных преимуществ PLD является возможность близкого к стехиометрическому переноса сложного состава мишени в растущую пленку, что особенно важно при получении многокомпонентных материалов, включая соединения типа Гейслера. После успешной демонстрации осаждения высокотемпературных купратных сверхпроводников методом PLD [72] эта технология получила широкое распространение и в дальнейшем была применена для получения тонких пленок из сотен различных материалов [73].

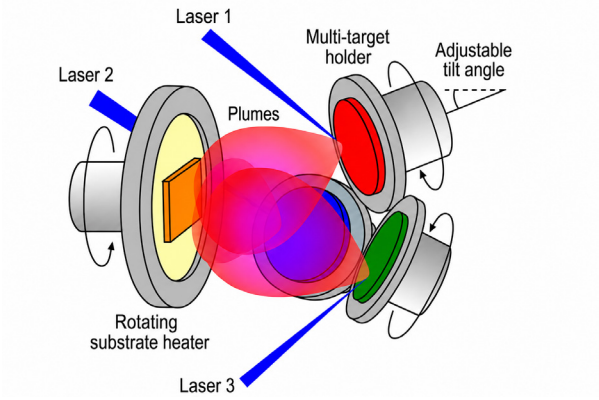


Рис. 5 [74]. Схематическое изображение многолучевой системы импульсного лазерного осаждения (PLD) с несколькими мишенями и вращающимся нагреваемым держателем подложки

К числу преимуществ PLD относится импульсный и существенно неравновесный характер процесса: короткие лазерные импульсы высокой плотности мощности (порядка 1 ГВт/см^2) вызывают абляцию материала мишени и формирование плазменного факела, из которого на подложке конденсируются атомы, ионы и кластеры [75, 76]. Благодаря этому метод оказывается особенно эффективным при получении многокомпонентных тонких пленок, включая соединения типа Гейслера, для которых принципиальное значение имеют сохранение заданного состава и контроль фазового состояния материала [77 – 79].

Несмотря на преимущества импульсного лазерного осаждения, процесс сопровождается рядом вторичных эффектов, связанных с распылением неатомарного материала. Один из них – это гидродинамическое распыление, возникающее при образовании расплавленной поверхности под действием последовательных лазерных импульсов [69, 70]. В результате всплесков расплава на мишени (рис. 6), жидкие капли выбрасываются вместе с плазменным облаком, и они могут оседать на подложке, формируя микроскопические включения [71, 73, 77]. В металлических мишенях это явление усиливается вследствие высокой поглощающей

способности и короткого времени релаксации проводящих электронов [80]. Еще один побочный процесс – это эксфолиационное распыление, вызванное термическим ударом и фрагментацией материала с высоким коэффициентом теплового расширения [81].

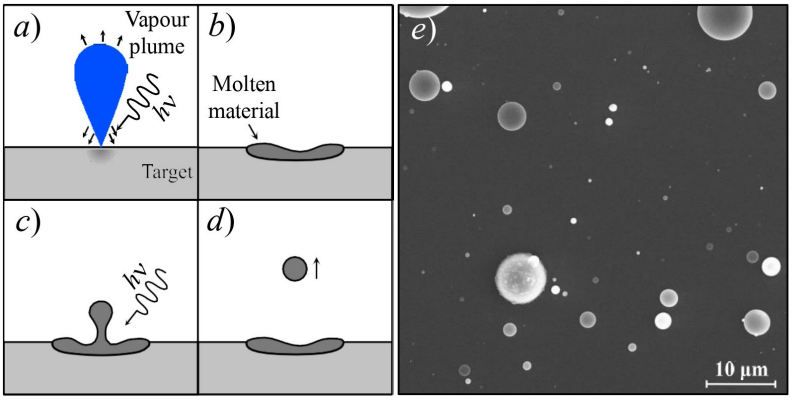


Рис. 6 [82]. Пути гидродинамического образования капель при PLD: испарение и расплав мишени (*a* – *d*), а также микрофотография капель на поверхности пленки TiNiSn (*e*)

Магнетронное распыление. Метод магнетронного распыления широко применяется для получения металлических и многослойных тонкопленочных структур с высокой воспроизводимостью технологических параметров [83 – 85] и показал свою эффективность при синтезе пленок на основе полугейслеровых соединений MNiSn (M = Ti, Zr, Hf). К основным преимуществам магнетронного распыления относятся контроль стехиометрии и микроструктуры покрытия, возможность осаждения при сравнительно низкой температуре подложки, а также хорошая технологическая масштабируемость [86, 87]. Для многокомпонентных сплавов Гейслера особенно важен вариант совместного распыления, в том числе в многомишенной конфигурации (рис. 7), поскольку он позволяет независимо регулировать потоки отдельных компонентов и тем самым задавать требуемый элементный состав пленки. На примере TiNiSn показано, что совместное распыление Ti, Ni и Sn из трех независимых источников с раздельной регулировкой мощности обеспечивает контролируемое соотношение элементов, поступающих на подложку, и позволяет получать однородные пленки на гибких подложках уже при комнатной температуре. При этом сохраняется высокая воспроизводимость состава и функциональных свойств получаемых покрытий [88]. Дополнительные возможности предоставляет комбинаторное осаждение пленок Ti–Ni–Sn методом совместного магнетронного распыления. Такой подход позволяет формировать управляемый градиент состава по поверхности подложки, исследовать эффекты, связанные с отклонением от стехиометрии, включая самолегирование, и получать серии образцов с различным соотношением компонентов в рамках одного технологического цикла. Благодаря этому совместное магнетронное распыление является эффективным инструментом как для оптимизации состава полугейслеровых тонких пленок, так и для ускоренного поиска перспективных градиентных структур [89]. Для эпитаксиальных пленок TiNiSn и твердого раствора $Zr_{0,5}Hf_{0,5}NiSn$ применение DC-магнетронного распыления (осуществляется под действием постоянного отрицательного напряжения и магнитного поля) с раздельным контролем потоков компонентов обеспечивает управляемые кристаллографическую текстуру и транспортные характеристики; это говорит об эффективности многоисточникового (в том числе совместного) распыления (*англ.* co-sputtering) для многоэлементных систем MNiSn [90].

В случаях, когда использование нескольких катодов для совместного распыления технически затруднено, возможен альтернативный подход – использование составных мишеней. На рис. 8, *a* показана мозаичная составная мишень Ti-Zr-Ni-Sn, собранная из отдельных сегментов (“pie-segments”), которая обеспечивает равномерное испарение элементов с различными физико-химическими свойствами. На рис. 8, *b* приведен пример сегментированной мишени, сформированной из клиновидных секторов Ti, Zr, Ni и Sn,

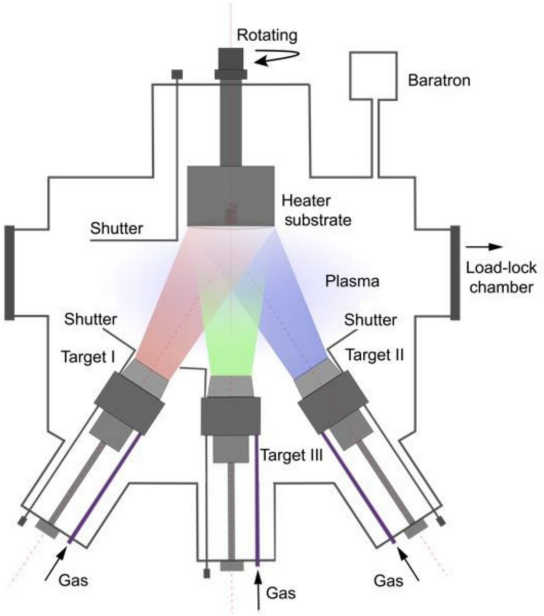


Рис. 7. Схематическое изображение трехкатодной установки для совместного распыления компонентов (triple-target magnetron co-sputtering); это модифицированное изображение из литературного источника [91]

что позволяет точно регулировать локальную стехиометрию в зоне плазмы. Рис. 8, *c* демонстрирует общий принцип магнетронного распыления многокомпонентных систем из одного магнетрона, обеспечивающего получение однородных тонких пленок заданного состава.

Еще одним подходом к получению тонких пленок на основе полугейслеровых соединений MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) является использование самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (*англ.* Self-propagating High-temperature Synthesis (SHS)) в многослойных реакционноспособных наноструктурах (рис. 9). В этом случае исходные многослойные системы формируют методом вакуумного магнетронного распыления путем последовательного осаждения чередующихся слоев M, Ni и Sn толщиной порядка 10 – 50 нм. В многослойной системе MNiSn чередование тонких слоев резко увеличивает площадь контакта между компонентами и сокращает путь взаимной диффузии. Поэтому после инициирования реакции

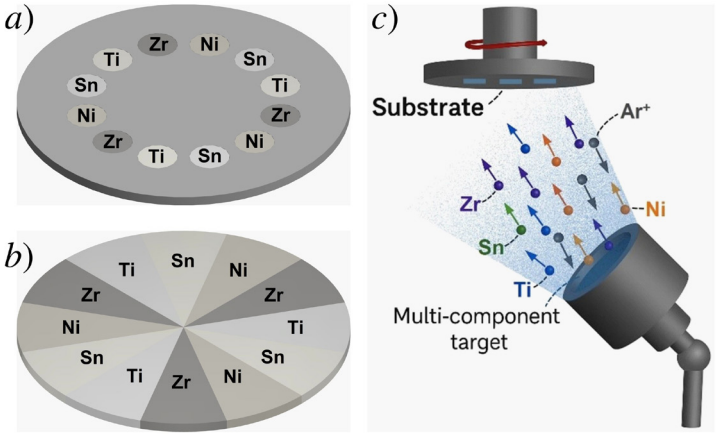


Рис. 8. Примеры используемых мишеней: *a* – Ti-Zr-Ni-Sn, мозаичная, составленная из отдельных сегментов (“pie-segments”) (модифицировано по данным [92]); *b* – сегментированная, составленная из клиновидных секторов Ti, Zr, Ni, Sn (модифицировано по [93]); *c* – процесс магнетронного распыления многокомпонентных сплавов [94]

взаимодействие между слоями развивается быстро уже без длительного внешнего нагрева [95, 96] При подаче электрического импульса в такой структуре возникает самораспространяющийся тепловой фронт. По литературным данным, его температура составляет примерно 1200 – 1600 °C, а скорость распространения – около 1 – 5 м/с. Прохождение фронта через многослойную наноструктуру запускает твердофазное взаимодействие M, Ni и Sn и приводит к образованию упорядоченных интерметаллидных фаз полугейслерового типа [97, 98].

Сравнение физических методов получения тонких пленок MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) показывает, что универсального технологического решения для этих материалов пока не существует. Импульсное лазерное осаждение с несколькими мишенями удобно для

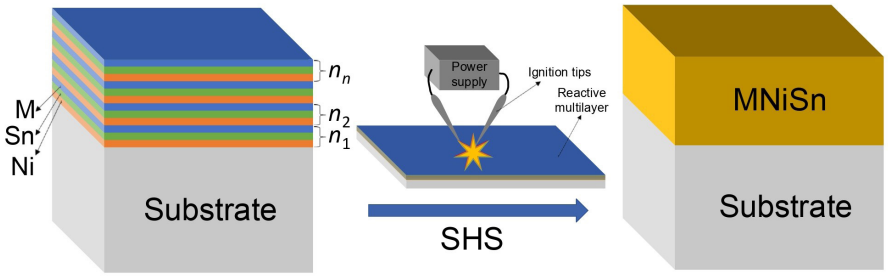


Рис. 9. Схематическое представление процесса самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (SHS)

переноса сложного состава и формирования пленок в неравновесных условиях, что важно для многокомпонентных систем. Его применение, однако, ограничивается сравнительно низкой производительностью и трудностями масштабирования.

Совместное магнетронное распыление из нескольких одноэлементных источников дает более широкие возможности управления составом и позволяет получать многокомпонентные полугейслеровы пленки с высокой однородностью. При этом метод требует многокатодной конфигурации, независимого управления мощностью на каждом источнике и предварительной калибровки потоков распыляемых компонентов. Более простым решением является использование составных, мозаичных или сегментированных мишеней, особенно при отсутствии многокатодных систем, но существенно ограничивает диапазон варьирования состава. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез в реакционных многослойных системах MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) является энергоэффективным подходом к формированию интерметаллидных фаз полугейслерового типа без длительного внешнего нагрева. В то же время он требует предварительного получения сложной многослойной архитектуры, точного задания толщин отдельных слоев и контроля кинетики распространения реакционного фронта.

Таким образом, выбор метода получения тонких пленок MNiSn определяется требуемым соотношением между гибкостью управления составом, структурным качеством пленок, энергетической эффективностью и возможностью масштабирования технологического процесса.

Стратегия легирования

Полугейслеровы соединения MNiSn характеризуются выраженной зависимостью транспортных свойств от концентрации и типа носителей заряда, поэтому легирование является одним из основных инструментов управления их термоэлектрическими характеристиками. Для материалов *n*-типа наиболее эффективным подходом является донорное легирование сурьмой (Sb), ниобием (Nb), ванадием (V) и другими элементами, позволяющее достигать значений безразмерной термоэлектрической добротности ZT порядка 1,0 – 1,3 при повышенных температурах [99, 100]. Формирование проводимости *p*-типа в системах MNiSn, как правило, представляет собой более сложную задачу из-за особенностей зонной структуры и возможных эффектов самокомпенсации, однако частичное замещение атомов никеля атомами кобальта или иридия, а также введение акцепторов в позицию олова (индия, алюминия) позволяет стабилизировать *p*-тип проводимости и повысить термоэлектрическую эффективность полупроводника [99, 101]. Разработка стабильных и высокоэффективных составов как *n*-, так и *p*-типа особенно важна для создания термоэлектрических модулей, в том числе единичных термопар, состоящих из последовательно соединенных *n*- и *p*-ветвей. В температурном интервале 350 – 700 K оптимизация состава за счет легирования делает материалы на основе MNiSn конкурентоспособными по отношению к ряду традиционных среднетемпературных термоэлектриков, включая соединения на основе теллуридов свинца и германия (PbTe и GeTe) [50]. Дополнительные возможности повышения эффективности связаны с использованием наноструктурированных и аморфных тонких пленок [88], а также с введением многофункциональных легирующих элементов, таких как медь, которые могут одновременно изменять концентрацию носителей заряда и усиливать фононное рассеяние [49, 50, 57, 58].

Таблица 3

Термоэлектрические свойства и стратегии легирования систем MNiSn

Система и форма	Тип проводимости	Стратегия легирования/ дефект-инженерии	Основные параметры (примерно, RT или указанная *T*)	Источник
TiNiSn, $Zr_{0,5}Hf_{0,5}NiSn$, эпитаксиальные пленки	*n*-тип	Стехиометрические, управление эпитаксией и мультислоями	$Zr_{0,5}Hf_{0,5}NiSn$: $S \approx 63$ мкВ/К, $\rho \approx 14{,}1$, мкОм·м, $PF \approx 0{,}28$мВт/(м·К)^2 (RT)	[90]
HfNiSn, пленки		Частичное замещение Sn на Sb: $HfNi(Sn_{1-x}Sb_x)$	Без Sb: $S \approx -68$ мкВ/К, $PF \approx 1{,}3$ мкВт/(см·К^2); при $x \approx$ $\approx 0{,}045$ PF до $\approx 2{,}9$ мкВт/(см·К^2) (RT)	[86]
TiNiSn, аморфная пленка на гибких подложках	*n*-тип (потенциально)	Стехиометрическая TiNiSn без целевого легирования	Детальные ТЕ-параметры не приведены; акцент на адгезии и трещиностойкости при изгибе до 154°	[88]
$Zr_{1-x}Ta_xNiSn$, объемный сплав	*n*-тип	Ta^{5+} по узлу Zr^{4+}, $x \le 0{,}04$	Максимум ZT $\approx 0{,}72$ при 923 К для $Zr_{0,98}Ta_{0,02}NiSn$; PF высок, κ_l снижена	[102]
TiNiSn/HfNiSn, сверхрешетки (период $\approx$ $\approx 3 – 216$ нм)	*n*-тип (изоэлектронная замена Ti↔Hf)	Псевдолегирование за счет чередования TiNiSn/HfNiSn (границы слоев действуют как дефект-инженерия)	κ_l снижена с ≈ 7 до 1,77 Вт/(м·К) при уменьшении периода до 3 – 4 нм; $S \approx -70$ мкВ/К; $PF \approx 0{,}30$мкВт/(м·К^2) (300 К); ZT $\approx 0{,}35$ при 480 К (в 4,4 раза выше, чем у одиночных пленок)	[103]
$HfNi_{1-x}Co_xSn$, объемный сплав	*p*-тип при $x \ge 0{,}05$	Co по узлу Ni, подавление межузельных атомов Ni	При $x = 0{,}25$: $S \gtrsim 200$ мкВ/К, $PF \approx 2{,}2$ мВт/(м·К^2), $\kappa_l \approx 1{,}8$ Вт/(м·К), ZT $\approx 0{,}55$ при 973 К	[104]
$(Ti_{1-c}Al_c)NiSn$, объемный сплав	*p*-тип (при растворении Al $\le$ ат.%)	Al по узлу Ti; исследование растворимости и дефектов	Al – акцептор; DOS подтверждает *p*-тип; предел растворимости ≈ 1 ат.% Al при 1400 К; сверх этого образуются НН + Sn + NiAl	[105]

Обозначения: *T* – температура (RT – комнатная); *S* – коэффициент Зеебека; ρ – удельное электрическое сопротивление; PF – фактор мощности; ZT – термоэлектрическая добротность; κ_l – коэффициент теплопроводности.

Исследования по легированию полугейслеровых систем MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) (табл. 3) демонстрируют ряд эффективных подходов к управлению концентрацией носителей, однако для тонких пленок данные сфокусированы преимущественно на формировании материалов с проводимостью *n*-типа. Для тонкопленочных систем MNiSn наиболее подробно исследованы материалы с проводимостью *n*-типа. В частности, эпитаксиальные пленки TiNiSn и $Zr_{0,5}Hf_{0,5}NiSn$ характеризуются устойчивой электронной проводимостью: коэффициент Зеебека составляет примерно 60 – 70 мкВ/К, а фактор мощности достигает около 0,3 мВт/(м·К^2) [90]. Более высокие значения PF были получены при донорном легировании Sb в системе $HfNi(Sn_{1-x}Sb_x)$, где этот параметр возрастал до ~3 мкВт/(см·К^2) [86]. Отдельно следует отметить аморфные пленки TiNiSn, представляющие интерес не столько рекордными термоэлектрическими параметрами, сколько

возможностью использования в гибридных ТЭГ благодаря их механической гибкости [88]. Для объемных материалов *n*-типа также показана эффективность легирования тантала Ta в $Zr_{1-x}Ta_xNiSn$, позволяющего оптимизировать электронную проводимость [102].

Системы *p*-типа на основе MNiSn изучены заметно слабее. Основной прогресс в этом направлении связан преимущественно с объемными сплавами, такими как $HfNi_{1-x}Co_xSn$ [104] и $(Ti_{1-c}Al_c)NiSn$ [105], а также со сверхрешетками TiNiSn/HfNiSn, в которых снижение теплопроводности достигается за счет межфазного рассеяния фононов [103]. В системе $(Ti_{1-c}Al_c)NiSn$ алюминий проявляет акцепторное поведение, однако его растворимость крайне мала и составляет около 1 ат.% при 1400 K. При дальнейшем увеличении содержания алюминия твердый раствор теряет устойчивость; это сопровождается выделением сопутствующих фаз, прежде всего Sn и NiAl [105]. Это существенно затрудняет практическое получение стабильных материалов *p*-типа в данном классе полугейслеровых соединений.

В результате число экспериментальных работ, посвященных тонкопленочным системам MNiSn с проводимостью *p*-типа, остается весьма ограниченным. Данное обстоятельство указывает не только на сохраняющиеся материаловедческие трудности, но и на значительный потенциал дальнейших исследований, направленных на создание полноценных тонкопленочных термоэлектрических пар на основе полугейслеровых соединений MNiSn.

Современные достижения в исследовании термоэлектрических свойств сплавов MNiSn

Традиционные термоэлектрические материалы на основе теллурида висмута Bi_2Te_3 демонстрируют наибольшую эффективность вблизи комнатной температуры и в низкотемпературной области, как правило, в интервале 300 – 500 K, где их безразмерная термоэлектрическая добротность ZT достигает значений порядка единицы [16]. Вместе с тем практическое применение таких материалов ограничивается их склонностью к термической деградации при повышенных температурах, а также использованием дефицитных и сравнительно дорогих элементов. В диапазоне температур 500 – 800 K наиболее перспективны полугейслеровы сплавы, которые отличаются высоким значением термоэдс ($|\alpha|$ = 200 – 400 мкВ/K при 300 K) [16], металлической электропроводностью и высокой термостабильностью [16, 50]. Их высокую решеточную теплопроводность (примерно 10 Вт/(м·K) для MNiSn) [16] удалось существенно снизить методами легирования, наноструктурирования и оптимизации концентрации носителей [16, 57].

Соединения MNiSn представляют собой полупроводники *n*-типа с шириной запрещенной зоны $E_g \approx 0{,}2 - 0{,}4$ эВ [50, 86]. В исходном состоянии они обладают значением термоэдс $\alpha \approx -300$ мкВ/K и низкой удельной электропроводностью σ вследствие малой концентрации носителей (порядка $10^{18} - 10^{19}$ см$^{-3}$) [16], однако при легировании до концентрации $10^{20} - 10^{21}$ см$^{-3}$ достигаются высокие значения силового фактора PF и термоэлектрической добротности ZT [16, 57]. Так, внесение 1 – 2% сурьмы в сплав TiNiSn или ZrNiSn обеспечивают величины PF более 3 мВт/(м·K^2) и ZT около 0,3 – 0,5 при 300 K (до 1 при 700 K) [16, 106].

За последнее десятилетие улучшены как сплавы *n*-MNiSn [107], так и новые соединения *p*-типа (NbFeSb, TaFeSb, ZrCoBi) [50, 108 – 110]. Современные материалы MNiSn достигают значений ZT около 0,8 – 1,0 при температурах 700 – 800 K [55, 111] и обладают высокой механической прочностью [109, 112]. Твердые растворы (Ti,Zr)NiSn демонстрируют $ZT \approx 1{,}1 - 1{,}2$ при 800 K [55, 113], включая системы, свободные от гафния; например $(Ti_{0,5}Zr_{0,5})NiSn$ ($ZT \approx 1{,}1$ при 823 K) [55, 113].

Особое значение имеет резонансное легирование полугейслеровых соединений. Показано, что введение менее 1 ат.% ванадия в сплав (Hf,Zr)NiSn приводит к формированию резонансного энергетического уровня в электронной структуре, что способствует увеличению фактора мощности PF примерно на 120% и позволяет достичь безразмерной термоэлектрической добротности ZT порядка 1,0 при температуре около 873 K [114, 115]. Важным преимуществом данного подхода является использование сравнительно распространенных и технологически доступных элементов [47]. Дополняющим направлением являются полугейслеровы сплавы NbFeSb *p*-типа, для которых сообщаются значения ZT порядка 1,0 – 1,5 при температурах свыше 900 K [113, 116 – 118]. В сочетании с

материалами *n*-типа на основе MNiSn такие соединения представляют интерес для формирования высокоэффективных термоэлектрических пар, работающих в средне- и высокотемпературном диапазонах [50].

Анализ опубликованных данных по термоэлектрическим свойствам систем MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), представленных в табл. 4, указывает на существенное различие между достигнутыми параметрами объемных и тонкопленочных материалов. Для тонких пле-

Таблица 4

Значения термоэлектрических параметров полугейслеровых сплавов MNiSn

Форма	Система	S_{max}, мкВ/К	$(PF)_{max}$, мВт/(м·К^2)	$(ZT)_{max}$	Источник
Пленка	TiNiSn	–47,1 (550 K)	–	–	[119]
		–105,3 (485 K)	–	–	[120]
	ZrNiSn	–112,2 (393 K)	2,66 (393 K)	–	[121]
	HfNiSn	–54,4 (485 K)	–	–	[120]
Объемный сплав	TiNiSn	–250 (440 K)	4,00 (760 K)	0,97 (822 K)	[55]
	TiNiSn	–320 (318 K)	2,50 (715 K)	0,30 (770 K)	[122]
	ZrNiSn	–270 (548 K)	3,70 (705 K)	0,99 (822 K)	[55]
	HfNiSn	–266 (550 K)	2,38 (600 K)	0,55 (777 K)	[55]
	$Ti_{0,5}Zr_{0,5}NiSn$	–293 (300 K)	3,75 (774 K)	1,10 (823 K)	[123]
	$Ti_{0,4}Zr_{0,6}NiSn$	–195 (577 K)	2,10 (725 K)	0,45 (775 K)	[124]
	$Ti_{0,2}Zr_{0,8}NiSn$	–244 (577 K)	1,60 (775 K)	0,38 (775 K)	[124]
	$Ti_{0,4}Hf_{0,6}NiSn$	–215 (615 K)	1,75 (708 K)	0,46 (773 K)	[125]
	$Ti_{0,8}Hf_{0,2}NiSn$	–185 (620 K)	2,49 (665 K)	0,43 (675 K)	[122]
	$Ti_{0,95}Hf_{0,05}NiSn$	–265 (420 K)	2,60 (709 K)	0,41 (770 K)	[122]
	$Hf_{0,75}Zr_{0,25}NiSn$	–208 (700 K)	1,45 (700 K)	–	[126]
	$Ti_{0,26}Zr_{0,37}Hf_{0,37}NiSn$	–294 (573 K)	3,10 (773 K)	0,74 (773 K)	[127]

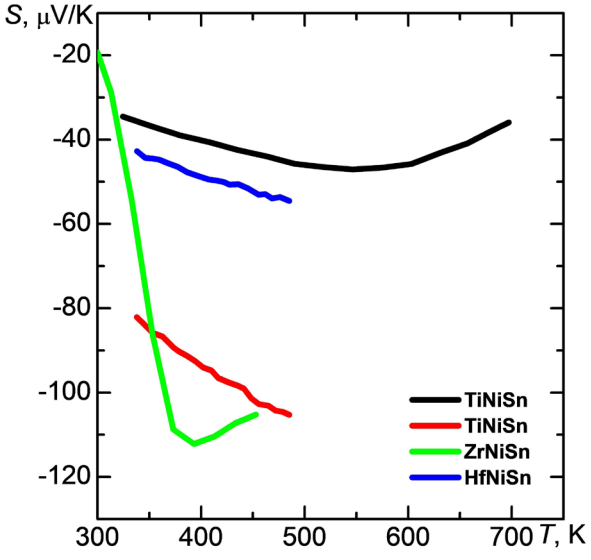


Рис. 10 [119 – 121]. Температурные зависимости коэффициента Зеебека тонких пленок MNiSn по данным разных литературных источников

нок TiNiSn, ZrNiSn и HfNiSn (рис. 10) максимальные значения коэффициента Зеебека, как правило, находятся в диапазоне 50 – 110 мкВ/К [119 – 121], тогда как фактор мощности PF остается ограниченным и не превышает 2,7 мВт/(м·К^2) [121]. В опубликованных данных показатели ZT для пленок, как правило, отсутствуют или близки к пренебрежимо малым значениям [119 – 121], что указывает на недостаточную оптимизацию как электронной структуры, так и теплопереноса в наномасштабе.

В противоположность этому, объемные сплавы демонстрируют значительно более высокую эффективность. Для материалов TiNiSn, ZrNiSn и HfNiSn достигаются значения PF до 4,0 мВт/(м·К^2) и ZT ≈ 0,9 – 1,1 в диапазоне 770 – 823 К [55, 122, 123], при этом твердые растворы на основе Ti–Zr–Hf (например, $Ti_{0,5}Zr_{0,5}NiSn$) обеспечивают максимальные значения ZT около 1,1 [123].

Даже при высоких концентрациях гафния (или в его сочетаниях с Ti/Zr) сохраняются стабильные значения ZT: примерно 0,4 – 0,8 [124 – 127].

Таким образом, к настоящему времени основной прогресс в оптимизации полугейслеровых материалов достигнут преимущественно для объемных сплавов, тогда как тонкопленочные системы MNiSn остаются изученными в значительно меньшей степени. Для них по-прежнему актуальны вопросы управления размерными эффектами, межфазными и зеренными границами, а также снижения решеточной теплопроводности без ухудшения электрического транспорта. Именно эти направления, по-видимому, будут определять дальнейшее развитие тонкопленочных полугейслеровых термоэлектриков.

Инновационные конструкции и повышение эффективности гибких тонкопленочных термоэлектрических генераторов

Несмотря на существенный прогресс в исследовании объемных полугейслеровых термоэлектриков, тонкопленочные материалы на основе MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) остаются самостоятельным и быстро развивающимся направлением. Интерес к ним связан прежде всего с возможностью интеграции в микро- и наноразмерные термоэлектрические устройства. В тонкопленочной геометрии можно реализовать такие архитектуры преобразователей, которые трудно получить на основе объемных элементов, а также усилить межфазное рассеяние фононов и тем самым снизить теплопроводность. Это особенно важно для работы в диапазоне 300 – 800 K, характерном для утилизации низко- и среднепотенциального промышленного тепла [1 – 7].

Отдельное направление связано с применением тонкопленочных полугейслеровых материалов в автономной электронике и биомедицинских устройствах. Малые температурные градиенты между поверхностью тела и окружающей средой могут быть использованы для питания носимых и имплантируемых систем, включая кардиостимуляторы, инсулиновые помпы и биосенсоры [9, 25, 38].

В области тонкопленочных термоэлектрических генераторов постепенно смещается акцент от простой оптимизации материала к одновременному подбору состава, структуры и конструктивного исполнения устройства. Тонкопленочный формат облегчает миниатюризацию, интеграцию с планарными технологиями и формирование гибких преобразователей энергии. Кроме того, использование сплавов Гейслера на основе переходных металлов вместо традиционных термоэлектрических материалов, содержащих более токсичные или дефицитные элементы, позволяет снизить экологические и массогабаритные ограничения системы и более гибко управлять транспортными свойствами [128 – 131]. В результате такие материалы могут быть использованы на гибких подложках и поверхностях сложной геометрии.

При этом дальнейшее повышение эффективности тонкопленочных ТЭГ не может быть сведено только к увеличению ZT активного материала. Для сохранения механической гибкости и повышения выходной мощности необходимо учитывать геометрию ветвей, тепловое сопротивление контактов, распределение температурного поля и условия теплообмена. Поэтому оптимизация конструктивных параметров становится не менее важной, чем улучшение транспортных и тепловых свойств самих материалов [132]. Комплексный подход, объединяющий разработку материала и рациональный дизайн системы, способен обеспечивать значимый прирост рабочих показателей и открывает новые возможности для повышения общей производительности термоэлектрических устройств.

Развитие тонкопленочных термоэлектрических генераторов (ТЭГ), включая системы на основе полугейслеровых сплавов MNiSn, тесно связано с прогрессом в области архитектуры, варианты которых представлены на рис. 11 (изображения модифицированы по данным работы [133]): *a* – многослойная архитектура из свободностоящих тонких пленок; *b* – масштабируемая или многослойная конфигурация, основанная на модуле из архитектуры (*a*); *c* – ТЭГ на подложке; *d* – возможность намотки или свертывания конструкции из ТЭГ (*c*) в зависимости от области применения; *e* – ТЭГ на подложке с продольным расположением электродов вдоль каждого элемента; *f* – гофрированная структура на основе массива из ТЭГ (*e*); *g* – схема процесса формирования «башенных» тонкопленочных ТЭГ.

В наиболее раннем варианте исполнения (см. рис. 11, *a*) *p*- и *n*-слои последовательно осаждаются на подложку, формируя многослойную тонкопленочную систему [134 – 138]. Такая стратифицированная конфигурация позволяет достичь высокой плотности термоэлектрических пар; однако практическая реализация сталкивается с трудностями при формировании устойчивого температурного градиента вдоль всей длины устройства. Другой вариант конструктивного исполнения, представленный на рис. 11, *b*, основан на объединении нескольких тонкопленочных термоэлектрических модулей в «чешуйчатую» архитектуру. В такой конфигурации активные элементы располагаются над источником тепла через теплоизоляционную прослойку, что позволяет сформировать более благоприятное распределение температурного поля и одновременно уменьшить общую высоту термоэлектрического генератора [139, 140].

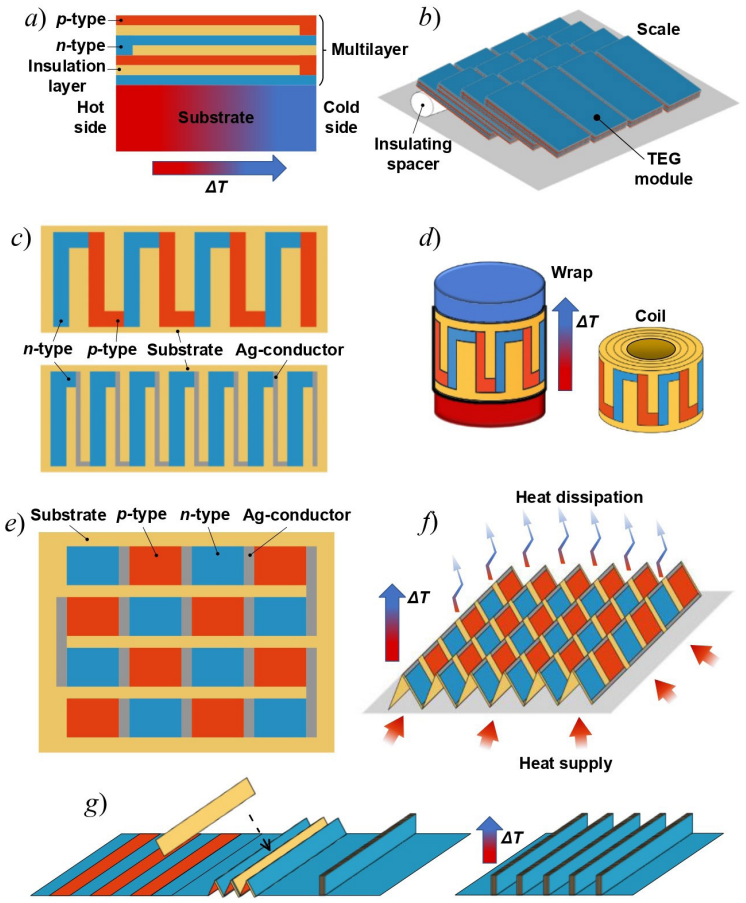


Рис. 11. Варианты конструкции тонкопленочных ТЭГ (*a* – *f*); *d* – возможность намотки или свертывания конструкции из ТЭГ (*c*) в зависимости от области применения; *g* – схема процесса формирования «башенных» тонкопленочных ТЭГ (см. описание всех вариантов в тексте)

Вариант конструкции на гибкой подложке (см. рис. 11, *c*), широко используемый и для пленок MNiSn, создает условия для применения печатных технологий [141 – 149], хотя необходимость разнесения элементов приводит к снижению удельной мощности. Намотанные и свернутые варианты исполнения (см. рис. 11, *d*) повышают энергоемкость, но неизбежно ограничивают гибкость конструкции. Модификации с продольным размещением электродов на рис. 11, *e*, *f* позволяют формировать тепловой перепад посредством складывания массива, приближая ее к коммерческим устройствам, однако усложняют конструкцию [150 – 154].

Особый интерес, относящийся к тонкопленочным материалам, включая MNiSn, представляет концепция «башенного» ТЭГ (см. рис. 11, *g*), предложенная в работе [133]. Здесь

модуль строится из чередующихся *p*- и *n*-областей, что устраняет необходимость в межэлементных контактах и допускает миниатюризацию, недостижимую в архитектуре на рис. 11, *f*. Отсутствие подложки на холодной стороне сохраняет гибкость, тогда как плотность активных элементов приближается к структурам типа «чешуек». Возможность адаптировать схему к любым материалам, пригодным для чередующегося полупроводникового рисунка [155 – 160], а также потенциал повышения мощности за счет уменьшения шага и увеличения высоты элементов делает данную архитектуру перспективной платформой для тонкопленочных ТЭГ на основе MNiSn.

Заключение

В данном обзоре проанализированы современные достижения и представления о структуре, физических свойствах и термоэлектрических характеристиках полугейслеровых сплавов типа MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), рассматриваемых как перспективные материалы для тонкопленочных термоэлектрических генераторов (ТЭГ), функционирующих в низко- и среднетемпературном диапазонах. В обзоре показано, что соединения MNiSn сочетают кристаллическую упорядоченность, механическую устойчивость и возможность управления электронной структурой. Благодаря этому они могут рассматриваться как альтернатива материалам на основе теллурида висмута в тех случаях, когда наряду с термоэлектрической эффективностью важны термическая стойкость, экологическая безопасность и совместимость с планарными технологиями. К таким применениям относятся микрочипы, датчики, биосенсоры и другие интегрируемые устройства.

Анализ кристаллических, фазовых, электронных и фононных свойств показывает, что характеристики MNiSn могут быть улучшены за счет выбора условий синтеза, легирования, наноструктурирования и управления дефектной структурой. В то же время достигнутый прогресс относится главным образом к объемным образцам. Тонкопленочные системы MNiSn изучены значительно меньше, хотя опубликованные данные по эпитаксиальным пленкам, сверхрешеткам и наноструктурированным покрытиям указывают на возможность снижения теплопроводности и повышения термоэлектрической эффективности.

Перспективы практического применения этих материалов во многом связаны с тонкопленочными термоэлектрическими генераторами. Для таких устройств важны не только свойства активного материала, но и конструкция: геометрия ветвей, тепловое сопротивление контактов, механическая гибкость и условия теплообмена. Оптимизация этих параметров может расширить использование тонкопленочных ТЭГ в носимой электронике, автономных микроэнергетических системах и сенсорных платформах.

Таким образом, дальнейшие исследования тонкопленочных материалов MNiSn целесообразно сосредоточить на связи между составом, структурой, теплопереносом и электрическим транспортом. Такой подход необходим для разработки термически устойчивых и технологически совместимых термоэлектрических устройств на основе полугейслеровых соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. U.S. Department of Energy. Quadrennial technology review 2015. Technology Assessment 6M: Waste Heat Recovery Systems. Washington, DC: U.S. Department of Energy, 2015.

2. **Firth A., Zhang B., Yang A.** Quantification of global waste heat and its environmental effects // Appl. Energy. 2019. Vol. 235. 1 Feb. Pp. 1314–1334.

3. **Forman C., Muritala I. K., Pardemann R., Meyer B.** Estimating the global waste heat potential // Renew. Sustain. Energy Rev. 2016. Vol. 57. May. Pp. 1568–1579.

4. **Hajlasz M., Helmcke S., Liebach F., et al.** Waste not: Unlocking the potential of waste heat recovery. Wuqiao, Hebei (China): McKinsey & Company, 2023. Pp. 1–8.

5. **Kober M.** The high potential for waste heat recovery in hybrid vehicles: A comparison between the potential in conventional and hybrid powertrains // J. Electron. Mater. 2020. Vol. 49. No. 5. Pp. 2928–2936.

6. **Oyedepo S. O., Fakeye B. A.** Waste heat recovery technologies: Pathway to sustainable energy development // J. Therm. Eng. 2021. Vol. 7. No. 1. Pp. 324–348.

7. **Huang K., Yan Y., Li B., et al.** A novel design of thermoelectric generator for automotive waste heat recovery // Automot. Innov. 2018. Vol. 1. No. 1. Pp. 54–61.

8. **Bhakta S., Kundu B.** A review of thermoelectric generators in automobile waste heat recovery systems for improving energy utilization // Energies. 2024. Vol. 17. No. 5. P. 1016.

9. **Miao L., Zhu S., Liu C., et al.** Comfortable wearable thermoelectric generator with high output power // Nat. Commun. 2024. Vol. 15. Oct. 02. P. 8516.

10. **Olabi A. G.** Potential applications of thermoelectric generators (TEGs) in various waste heat recovery systems // Int. J. Thermofluids. 2022. Vol. 16. Nov. P. 100249.

11. **Tang Y., Zhao X., Li Y.** A novel thermoelectric system for enhancing power generation from waste heat // Energy Convers. Manag. 2025. Vol. 344. 15 Nov. P. 120262.

12. **Xie H., Zhang Y., Gao P.** Thermoelectric-powered sensors for Internet of things // Micromachines. 2023. Vol. 14. No. 1. P. 31.

13. **Xiao D., Sun P., Wu J., et al.** Thermoelectric generator design and characterization for industrial pipe waste heat recovery // Processes. 2023. Vol. 11. No. 6. P. 1714.

14. **Li G., Yang Y., Xiao Y., et al.** Flue gas waste heat thermoelectric generator: Laboratory experiment and demonstration application // Case Stud. Therm. Eng. 2024. Vol. 61. Sept. P. 104953.

15. **Gu Z., He S., Li X., et al.** Hundred-watt implantable TEG module for large-scale exhaust gas waste heat recovery // Energies. 2024. Vol. 17. No. 3. P. 665.

16. **Xie W., Weidenkaff A., Tang X., et al.** Recent advances in nanostructured thermoelectric half-Heusler compounds // Nanomaterials. 2012. Vol. 2. No. 4. Pp. 379–412.

17. **Al-Janabi A., Al Salmi O., Alsubhi E., Alhadhrami A.** Thermoelectric generators as a heat recovery system for exhaust gases of vehicles driving at low speeds // Eng. Technol. J. 2023. Vol. 41. No. 1. Pp. 185–195.

18. **Hao Z., Hu R., Gao Y., et al.** Design and experimental study of a prefabricated building thermoelectric power generation-wall system for severe cold climates // Buildings. 2025. Vol. 15. No. 7. P. 1076.

19. **Lae Yi Win S., Liao C.-T., Chang H.-Y., Lai C.-M.** Experimental observations on electricity generation and thermal characteristics of TEG façades // Energy Build. 2023. Vol. 294. 1 Sept. P. 113225.

20. **Álvarez-Carulla A., Saiz-Vela A., Puig-Vidal M., et al.** High-efficient energy harvesting architecture for self-powered thermal-monitoring wireless sensor node based on a single thermoelectric generator // Sci. Rep. 2023. Vol. 13. No. 1. P. 1637.

21. **Lee Y., Park N.** Self-powered wireless sensor system utilizing a thermoelectric generator for photovoltaic module monitoring application // Sol. Energy. 2024. Vol. 283. 15 Nov. P. 113026.

22. **Yanagisawa R., Koike S., Nawae T., et al.** Planar-type silicon thermoelectric generator with phononic nanostructures for 100 μW energy harvesting // arXiv preprint arXiv:2307.11382. 2023.

23. **Dimaggio E., Masci A., De Seta A., et al.** On-chip thermoelectric devices based on standard silicon processing // Small. 2024. Vol. 20. No. 51. P. 2405411.

24. **Dutt A. S., Pulumati N. B., Deng K., et al.** High power density micro thermoelectric generators for powering IoTs // Adv. Electron. Mater. 2024. Vol. 11. Nov. P. 2400198.

25. **Zhu S.** Review on wearable thermoelectric generators: From devices to applications // Energies. 2022. Vol. 15. No. 9. P. 3375.

26. **Lee B., Cho H., Park K. T., et al.** High-performance compliant thermoelectric generators with magnetically self-assembled soft heat conductors for self-powered wearable electronics // Nat. Commun. 2020. Vol. 11. Nov. P. 5948.

27. **Yan J.** Review of micro thermoelectric generator // J. Microelectromech. Syst. 2018. Vol. 27. No. 1. Pp. 1–18.

28. **Yang S., Li Y., Deng L., et al.** Flexible thermoelectric generator and energy management electronics powered by body heat // Microsyst. Nanoeng. 2023. Vol. 9. 24 Aug. P. 106.

29. **He X., Shi X.-L., Wu X., et al.** Three-dimensional flexible thermoelectric fabrics for smart wearables // Nat. Commun. 2025. Vol. 16. 14 Mar. P. 2523.

30. **Yang D., Shi X.-L., Li M., et al.** Flexible power generators by Ag_2Se thin films with record-high thermoelectric performance // Nat. Commun. 2024. Vol. 15. 31 Jan. P. 923.

31. **Shwetha M., Lakshmi S.** Design and analysis of batteryless cardiac pacemaker through combining thermoelectric generators along with DC-DC converter // Int. Trans. Electr. Energy Syst. 2021. Vol. 31. No. 12. P. e13162.

32. **Choi H., Biswas S., Lang P., et al.** A current development of energy harvesting systems for energy-independent bioimplantable biosensors // Small. 2024. Vol. 20. No. 43. P. 2403899.

33. **Rao Y., Voss M., Bechtold T., Hohlfeld D.** Implantable thermoelectric generator with high aspect ratio thermolegs and integrated voltage converter // Proceedings of 2023 IEEE 22nd International Conference on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications (PowerMEMS). Dec. 11–14, 2023. New York University Abu Dhabi (United Arab Emirates). Pp. 206–209.

34. **Hinchet R., Yoon H.-J., Ryu H., et al.** Transcutaneous ultrasound energy harvesting using capacitive triboelectric technology // Science. 2019. Vol. 365. No. 6452. Pp. 491–494.

35. **Sattar M., Lee Y.-J., Kim H., et al.** Flexible thermoelectric wearable architecture for wireless continuous physiological monitoring // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2024. Vol. 16. No. 29. Pp. 37401–37417.

36. **Rao Y., Xu C., Voss M., Ying P., et al.** Fabrication and characterization of a thermoelectric generator with high aspect ratio thermolegs for electrically active implants // Adv. Mater. Technol. 2024. Vol. 9. No. 1. P. 2301157.

37. **Zadan M., Wertz A., Shah D., et al.** Stretchable thermoelectric generators for self-powered wearable health monitoring // Adv. Funct. Mater. 2024. Vol. 34. No. 39. P. 2404861.

38. **Hu B., Shi X.-L., Zou J., Chen Z.-G.** Thermoelectrics for medical applications: Progress, challenges, and perspectives // Chem. Eng. J. 2022. Vol. 437. 1 Jan. P. 135268.

39. **O'Brien R. C., Ambrosi R. M., Bannister N. P., et al.** Safe radioisotope thermoelectric generators and heat sources for space applications // J. Nucl. Mater. 2008. Vol. 377. No. 3. Pp. 506–521.

40. **Palaporn D., Tanusilp S.-A., Sun Y., et al.** Thermoelectric materials for space explorations // Mater. Adv. 2024. Vol. 5. No. 13. Pp. 5351–5364.

41. **Ai X., Wu Y., Lyu H., et al.** High-performance ZrNiSn-based half-Heusler thermoelectrics with hierarchical architectures enabled by reactive sintering // Nat. Commun. 2025. Vol. 16. 15 July. P. 6497.

42. **Aridi R., Faraj J., Ali S., Lemenand T., Khaled M.** Thermoelectric power generators: State-of-the-art, heat recovery method, and challenges // Electricity. 2021. Vol. 2. No. 3. Pp. 359–386.

43. **Li W., Ghosh S., Liu N., Poudel B.** Half-Heusler thermoelectrics: Advances from materials fundamental to device engineering // Joule. 2024. Vol. 8. No. 5. Pp. 1274–1311.

44. **Young J., Reddy R.** Processing and thermoelectric properties of TiNiSn materials: A review // J. Mater. Eng. Perform. 2019. Vol. 28. No. 10. Pp. 5917–5930.

45. **Min R., Gao Y., Jiang X., et al.** Enhancement in the thermoelectric performance of ZrNiSn-based alloys through extra Zr-rich nanoprecipitates with superstructures // Chem. Eng. J. 2023. Vol. 464. 15 May. P. 142531.

46. **Wunderlich W., Shinohara Y., Matsumura Y.** Magnetron sputtering of (TiZr)NiSn thin films on different substrates for thermoelectric applications // J. Phys. Conf. Ser. 2012. Vol. 379. No. 1. P. 012005.

47. **Douglas J. E., Birkel C. S., Miao M.-S., et al.** Enhanced thermoelectric properties of bulk TiNiSn via formation of a TiNi2Sn second phase // Appl. Phys. Lett. 2012. Vol. 101. No. 18. P. 183902.

48. **Öğüt S., Rabe K. M.** Band gap and stability in the ternary intermetallic compounds NiSnM (M = Ti, Zr, Hf): A first-principles study // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51. No. 16. Pp. 10443–10453.

49. **Halpin J. E., Jenkins B., Moody M. P., et al.** A correlative study of interfacial segregation in a Cu-doped TiNiSn thermoelectric half-Heusler alloy // ACS Appl. Electron. Mater. 2022. Vol. 4. No. 9. Pp. 4446–4454.

50. **Quinn R. J., Bos J.-W. G.** Advances in half-Heusler alloys for thermoelectric power generation // Mater. Adv. 2021. Vol. 2. No. 19. Pp. 6246–6266.

51. **Jain A., Ong S. P., Hautier G., et al.** Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Mater. 2013. Vol. 1. No. 1. P. 011002.

52. **Evers C. B. H., Richter C. G., Hartjes K., Jeitschko W.** Ternary transition metal antimonides and bismuthides with MgAgAs-type and filled NiAs-type structure // J. Alloys Compd. 1997. Vol. 252. No. 1–2. Pp. 93–97.

53. **Villars P., Calvert L. D.** Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases. Vols 1–3. Ohio (USA): American Society for Metals. Materials Park, ASM International, 1991. 3258 p.

54. **Jeitschko W.** Transition metal stannides with MgAgAs and $MnCu_2Al$ type structure // Metall. Trans. 1970. Vol. 1. No. 11. Pp. 3159–3162.

55. **Gürth M., Rogl G., Romaka V. V., et al.** Thermoelectric high ZT half-Heusler alloys $Ti_{1-x-y}Zr_xHf_yNiSn$ ($0 \le x \le 1$; $0 \le y \le 1$) // Acta Mater. 2016. Vol. 104. 1 Feb. Pp. 210–222.

56. **Murray J. L.** The Ti–Zr (titanium-zirconium) system // Bull. Alloy Phase Diagr. 1981. Vol. 2. No. 2. Pp. 197–201.

57. **Barczak S. A., Quinn R. J., Halpin J. E., et al.** Suppression of thermal conductivity without impeding electron mobility in *n*-type XNiSn half-Heusler thermoelectrics // J. Mater. Chem. A. 2019. Vol. 7. No. 47. Pp. 27124–27134.

58. **Barczak S. A., Halpin J. E., Buckman J., et al.** Grain-by-grain compositional variations and interstitial metals: A new route toward achieving high performance in half-Heusler thermoelectrics // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2018. Vol. 10. No. 5. Pp. 4786–4793.

59. **Horton M. K., Huck P., Yang R. X., et al.** Accelerated data-driven materials science with the Materials Project // Nat. Mater. 2025. Vol. 24. No. 10. Pp. 1522–1532.

60. **Ong S. P., Wang L., Kang B., Ceder G.** Li–Fe–P–O_2 phase diagram from first principles calculations // Chem. Mater. 2008. Vol. 20. No. 5. Pp. 1798–1807.

61. **Larson P., Mahanti S. D., Kanatzidis M. G.** Structural stability of Ni-containing half-Heusler compounds // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. No. 19. Pp. 12754–12762.

62. **Jia X., Deng Y., Bao X., et al.** Unsupervised machine learning for discovery of promising half-Heusler thermoelectric materials // npj Comput. Mater. 2022. Vol. 8. No. 1. P. 34.

63. **Page A.** Half-Heusler alloys as promising thermoelectric materials (Thesis). Ann Arbor, Michigan (USA): University of Michigan, Ann Arbor, 2017.

64. **Gałązka K., Populoh S., Sagarna L., et al.** Phase formation, stability, and oxidation in (Ti, Zr, Hf)NiSn half-Heusler compounds // Phys. Status Solidi A. 2014. Vol. 211. No. 6. Pp. 1259–1266.

65. **Gandi A. N., Schwingenschlögl U.** Electron-dominated thermoelectric response in MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) half-Heusler alloys // Phys. Chem. Chem. Phys. 2016. Vol. 18. No. 20. Pp. 14017–14022.

66. **Dresselhaus M. S.** Solid state physics. Part II: Optical properties of solids // Lecture Notes (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA). 2001. Vol. 17. Pp. 15–16.

67. **Zhang X., Zhang P., Xiao C., et al.** Physical basis of thermal conduction // X. Tian (Ed.). Thermal management materials for electronic packaging: Preparation, characterization, and devices. Weinheim (Germany): Wiley-VCH GmbH, 2024. Pp. 1–17.

68. **Ptak A. J.** Principles of molecular beam epitaxy (Chapter 4) // Kuech T. F. (Ed.). Handbook of crystal growth: Thin films and epitaxy. Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2015. Pp. 161–192.

69. **Eason R.** (Editor). Pulsed laser deposition of thin films: Applications-led growth of functional materials. London: John Wiley & Sons, Inc., 2007. 485 p.

70. **Cherief N., Givord D., Liénard A., et al.** Laser ablation deposition and magnetic characterization of metallic thin films based on rare earth and transition metals // J. Magn. Magn. Mater. 1993. Vol. 121. No. 1–3. Pp. 94–101.

71. **Ohtomo A., Kawasaki M., Sakurai Y., et al.** Room temperature ultraviolet laser emission from ZnO nanocrystal thin films grown by laser MBE // Mater. Sci. Eng. B. 1998. Vol. 54. No. 1–2. Pp. 24–28.

72. **Dijkkamp D., Venkatesan T., Wu X. D., et al.** Preparation of Y-Ba-Cu oxide superconductor thin films using pulsed laser evaporation from high T_c bulk material // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 51. No. 8. Pp. 619–621.

73. **Willmott P. R.** Deposition of complex multielemental thin films // Prog. Surf. Sci. 2004. Vol. 76. No. 6. Pp. 163–217.

74. **Eason R. W., May-Smith T. C., Grivas C., et al.** Current state-of-the-art of pulsed laser deposition of optical waveguide structures: Existing capabilities and future trends // Appl. Surf. Sci. 2009. Vol. 255. No. 10. Pp. 5199–5205.

75. **Cheung J. T., Sankur H.** Growth of thin films by laser-induced evaporation // Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 1988. Vol. 15. No. 1. Pp. 63–109.

76. **Willmott P. R., Huber J. R.** Pulsed laser vaporization and deposition // Rev. Mod. Phys. 2000. Vol. 72. No. 1. Pp. 315–328.

77. **Jagannadham K., Sharma A. K., Wei Q., et al.** Structural characteristics of AlN films deposited by pulsed laser deposition and reactive magnetron sputtering: A comparative study // J. Vac. Sci. Technol. A. 1998. Vol. 16. No. 5. Pp. 2804–2815.

78. **Rengan A., Biunno N., Narayan J., Moyer P.** Laser assisted techniques for diamond and diamondlike thin films // MRS Proc. 1989. Vol. 162. No. 185. P. 185.

79. **Doll G. L., Sell J. A., Taylor C. A. II, Clarke R.** Growth and characterization of epitaxial cubic boron nitride films on silicon // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 43. No. 8. Pp. 6816–6819.

80. **Kools J. C. S.** Pulsed laser deposition of metals (Chapter) // D. B. Chrisey, G. K. Hubler (Eds). Pulsed laser deposition of thin films. New York: John Wiley & Sons, 1994. 648 p.

81. **Kelly R., Miotello A.** Mechanisms of pulsed laser sputtering (Chapter) // D. B. Chrisey, G. K. Hubler (Eds). Pulsed laser deposition of thin films. New York: John Wiley & Sons, 1994. 648 p.

82. **Webster R. W. H.** Precise nanoscale characterization of novel Heusler thermoelectrics via analytical electron microscopy (Thesis). Glasgow, UK: University of Glasgow, 2020.

83. **Hopwood J.** Ionized physical vapor deposition of integrated circuit interconnects // Phys. Plasmas. 1998. Vol. 5. No. 5. Pp. 1624–1631.

84. **Rossnagel S. M.** Sputter deposition for semiconductor manufacturing // IBM J. Res. Dev. 1999. Vol. 43. No. 1/2. Pp. 163–179.

85. **Helmersson U., Lattemann M., Bohlmark J., et al.** Ionized physical vapor deposition (IPVD): A review of technology and applications // Thin Solid Films. 2006. Vol. 513. No. 1. Pp. 1–24.

86. **Wang S.-H., Cheng H.-M., Wu R.-J., Chao W.-H.** Structural and thermoelectric properties of HfNiSn half-Heusler thin films // Thin Solid Films. 2010. Vol. 518. No. 21. Pp. 5901–5904.

87. **Heinz S., Angel E. C., Trapp M., et al.** Phonon bridge effect in superlattices of thermoelectric TiNiSn/HfNiSn with controlled interface intermixing // Nanomaterials. 2020. Vol. 10. No. 6. P. 1239.

88. **Khayyamifar S., Sadowski G., Hektor J., Music D.** Amorphous TiNiSn thin films for mechanical flexibility in thermoelectric applications // Thin Solid Films. 2024. Vol. 807. 30 Oct. P. 140534.

89. **Wambach M., Stern R., Bhattacharya S., et al.** Unraveling self-doping effects in thermoelectric TiNiSn half-Heusler compounds by combined theory and high-throughput experiments // Adv. Electron. Mater. 2016. Vol. 2. No. 1. P. 1500208.

90. **Jaeger T., Mix C., Schwall M., et al.** Epitaxial growth and thermoelectric properties of TiNiSn and $Zr_{0.5}Hf_{0.5}NiSn$ thin films // Thin Solid Films. 2011. Vol. 520. No. 3. Pp. 1010–1014.

91. **Shu R.** Nonstoichiometric multicomponent nitride thin films (Thesis, Linköping Studies in Science and Technology. Licentiate Thesis Series). Linköping (Sweden): Linköping University, 2020.

92. **Golosov D. A., Melnikov S. N., Dostanko A. P.** Calculation of the elemental composition of thin films deposited by magnetron sputtering of mosaic targets // Surf. Eng. Appl. Electrochem. 2012. Vol. 48. No. 1. Pp. 52–59.

93. **Sieradzka K., Kaczmarek D., Morgiel J., et al.** Structural properties of transparent Ti-V oxide semiconductor thin films // Open Phys. 2013. Vol. 11. No. 2. Pp. 251–257.

94. **Nguyen V. T. A., Smirnova S. P., Savin D. A., et al.** Magnetron-sputtered Ni and ZrTiNiSn thin films on Si-substrate: Thickness influence on structural property and electrical conductivity // 2025 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). 16–17 Oct. 2025. St. Petersburg. Pp. 303–306.

95. **Sen S., Lake M., Schaaf P.** Al-based binary reactive multilayer films: Large area freestanding film synthesis and self-propagating reaction analysis // Appl. Surf. Sci. 2019. Vol. 474. 30 Apr. Pp. 243–249.

96. **Kvashenkina O. E., Gabdullin P. G., Osipov V. S.** Using the novel capable of SHS-reaction multilayer nanostructured material for soldering of lead-zirconate-titanate piezoceramic elements // J. Phys. Conf. Ser. 2019. Vol. 1236. No. 1. P. 012023.

97. **Adams D. P., Reeves R. V., Abere M. J., et al.** Ignition and self-propagating reactions in Al/Pt multilayers of varied design // J. Appl. Phys. 2018. Vol. 124. No. 9. P. 095105.

98. **Kvashenkina O. E., Udovenko S. A., Osipov V. S., et al.** Study of long-term post-SHS phase kinetics in Ni/Al reactive multilayer nanofoils // J. Phys. Conf. Ser. 2020. Vol. 1695. No. 1. P. 012181.

99. **Hu L., Han S., Zhu T., et al.** P-type dopability in half-Heusler thermoelectric semiconductors // npj Comput. Mater. 2025. Vol. 11. No. 1. P. 104.

100. **Rogl G., Rogl P. F.** Development of thermoelectric half-Heusler alloys over the past 25 years // Crystals. 2023. Vol. 13. No. 7. P. 1152.

101. **Mikami M., Miyazaki H., Nishino Y.** Enhanced thermoelectric performance by Hf substitution in *p*-type half-Heusler $TiNi_{0.8}Co_{0.2}Sn$ // Appl. Phys. Lett. 2025. Vol. 126. No. 13. P. 133903.

102. **Yang X., Jiang Z., Kang H. J., et al.** Enhanced thermoelectric performance of $Zr_{1-x}Ta_xNiSn$ half-Heusler alloys by diagonal-rule doping // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. Vol. 12. No. 3. Pp. 3773–3783.

103. **Hołuj P., Euler C., Balke B., et al.** Reduced thermal conductivity of TiNiSn/HfNiSn superlattices // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92. No. 12. P. 125436.

104. **Ai X., Lei B., Cichocka M. O., et al.** Enhancing the thermoelectric properties via modulation of defects in P-type MNiSn-based (M = Hf, Zr, Ti) half-Heusler materials // Adv. Funct. Mater. 2023. Vol. 33. No. 48. P. 2305582.

105. **Rabin D., Fuks D., Gelbstein Y.** Al solubility in $(Ti_{1-c}Al_c)NiSn$ half-Heusler alloy // Phys. Chem. Chem. Phys. 2019. Vol. 21. No. 14. Pp. 7524–7533.

106. **Wei J., Yang L., Ma Z., et al.** Review of current high-ZT thermoelectric materials // J. Mater. Sci. 2020. Vol. 55. No. 27. Pp. 12642–12704.

107. **Manzoor M., Saxena A., Singh P. K., et al.** Optoelectronic and thermoelectric properties of zirconium half-Heusler alloys RhZrX (X = P, As, Sb, Bi): An *ab-initio* investigation // J. Inorg. Organomet. Polym. Mater. 2025. Vol. 35. No. 3. Pp. 1845–1864.

108. **Quinn R. J., Stenning G. B., Bos J.-W. G.** Electronic scattering in half-Heusler thermoelectrics from resistivity data // J. Phys. Energy. 2022. Vol. 4. No. 2. P. 024005.

109. **Allan L., Mulwa W. M., Mwabora J. M., et al.** An *ab-initio* study of *p*-type ZrCoY (Y = Sb and Bi) half-Heusler semiconductors // Heliyon. 2023. Vol. 9. No. 8. P. e18531.

110. **Ma H., Yang C.-L., Wang M.-S., et al.** Effect of M elements (M = Ti, Zr, and Hf) on thermoelectric performance of the half-Heusler compounds MCoBi // J. Phys. D: Appl. Phys. 2019. Vol. 52. No. 25. P. 255501.

111. **Zhou J. W., Zhu H., Liu T.-H., et al.** Large thermoelectric power factor from crystal symmetry-protected non-bonding orbital in half-Heuslers // Nat. Commun. 2018. Vol. 9. 30 Apr. P. 1721.

112. **Kang H. B., Saparamadu U., Nozariasbmarz A., et al.** Understanding oxidation resistance of half-Heusler alloys for in-air high temperature sustainable thermoelectric generators // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. Vol. 12. No. 32. Pp. 36706–36714.

113. **Yu J. J., Fu C. G., Liu Y. T., et al.** Unique role of refractory Ta alloying in enhancing the figure of merit of NbFeSb thermoelectric materials // Adv. Energy Mater. 2018. Vol. 8. No. 1. P. 1701313.

114. **Simonson J. W., Wu D., Xie W. J., et al.** Introduction of resonant states and enhancement of thermoelectric properties in half-Heusler alloys // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. No. 23. P. 235211.

115. **Chauhan N. S., Bathula S., Vishwakarma A., et al.** Vanadium-doping-induced resonant energy levels for the enhancement of thermoelectric performance in Hf-free ZrNiSn half-Heusler alloys // ACS Appl. Energy Mater. 2018. Vol. 1. No. 2. Pp. 757–764.

116. **Joshi G., He R., Engber M., et al.** NbFeSb-based *p*-type half-Heuslers for power generation applications // Energy Environ. Sci. 2014. Vol. 7. 13 Oct. Pp. 4070–4076.

117. **Fu C., Bai S., Liu Y., et al.** Realizing high figure of merit in heavy-band *p*-type half-Heusler thermoelectric materials // Nat. Commun. 2015. Vol. 6. 02 Sept. P. 8144.

118. **Zhu H. T., Mao J., Li Y., et al.** Discovery of TaFeSb-based half-Heuslers with high thermoelectric performance // Nat. Commun. 2019. Vol. 10. 17 Jan. P. 270.

119. **Jäger T.** Thermoelectric properties of TiNiSn and $Zr_{0.5}Hf_{0.5}NiSn$ thin films and superlattices with reduced thermal conductivities (Thesis). Mainz (Germany): Johannes Gutenberg University Mainz, 2013.

120. **Komar P., Jaeger T., Euler C., et al.** Half-Heusler superlattices as model systems for nanostructured thermoelectrics // Phys. Status Solidi A. 2016. Vol. 213. No. 3. Pp. 732–738.

121. **Zhou Y., Tan Q., Zhu J., et al.** Thermoelectric properties of amorphous Zr-Ni-Sn thin films deposited by magnetron sputtering // J. Electron. Mater. 2015. Vol. 44. No. 6. Pp. 1957–1962.

122. **Kim S.-W., Kimura Y., Mishima Y.** High temperature thermoelectric properties of TiNiSn-based half-Heusler compounds // Intermetallics. 2007. Vol. 15. No. 3. Pp. 349–356.

123. **Van Du N., Tu N., Trung D. Q., et al.** Effects of the wheel rotation speed during the melt-spinning process on the structural morphology and the thermoelectric properties of $Ti_{0.5}Zr_{0.5}NiSn$ alloy // Vietnam J. Sci. Technol. Eng. 2023. Vol. 65. No. 4. Pp. 42–47.

124. **Mesaritis G., Ioannou I., Delimitis A., et al.** *n*-type (Zr, Ti)NiSn half Heusler materials via mechanical alloying: Structure, Sb-doping and thermoelectric properties // J. Phys. Chem. Solids. 2022. Vol. 167. Aug. P. 110735.

125. **Mesaritis G., Kyratsi T.** Hf incorporation in (Ti, Zr)NiSn half-Heusler solid solutions via mechanical alloying // Energies. 2022. Vol. 15. No. 21. P. 7885.

126. **Culp S. R., Poon S. J., Hickman N., et al.** Effect of substitutions on the thermoelectric figure of merit of half-Heusler phases at 800 °C // Appl. Phys. Lett. 2006. Vol. 88. No. 4. P. 042106.

127. **Park G., Lee H. S., Yi S.** Effects of annealing on the microstructure and thermoelectric properties of half-Heusler MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) // J. Electron. Mater. 2022. Vol. 51. No. 7. Pp. 3485–3494.

128. **Culebras M., Gymez C. M., Cantarero A.** Review on polymers for thermoelectric applications // Materials. 2014. Vol. 7. No. 9. Pp. 6701–6732.

129. **Kroon R., Mengistie D. A., Kiefer D., et al.** Thermoelectric plastics: from design to synthesis, processing and structure–property relationships // Chem. Soc. Rev. 2016. Vol. 45. No. 22. Pp. 6147–6164.

130. **Chen Y., Zhao Y., Liang Z.** Solution processed organic thermoelectrics: Towards flexible thermoelectric modules // Energy Environ. Sci. 2015. Vol. 8. No. 2. Pp. 401–422.

131. **Gayner C., Kar K. K.** Recent advances in thermoelectric materials // Prog. Mater. Sci. 2016. Vol. 83. Oct. Pp. 330–382.

132. **Elghool A., Basrawi F., Ibrahim T. K., et al.** A review on heat sink for thermoelectric power generation: Classifications and parameters affecting performance // Energy Convers. Manag. 2017. Vol. 134. 01 Febr. Pp. 260–277.

133. **Montgomery D. S.** Coupled thermoelectric and piezoelectric meta structures for renewable energy generation (Ph. D Thesis). Winston-Salem, USA: Wake Forest University, 2016.

134. **Hewitt C. A., Kaiser A. B., Roth S., et al.** Multilayered carbon nanotube/polymer composite based thermoelectric fabrics // Nano Lett. 2012. Vol. 12. No. 3. Pp. 1307–1310.

135. **Kim S. L., Choi K., Tazebay A., Yu C.** Flexible power fabrics made of carbon nanotubes for harvesting thermoelectricity // ACS Nano. 2014. Vol. 8. No. 3. Pp. 2377–2386.

136. **Piao M., Joo M.-K., Choi J. H., et al.** Evaluation of power generated by thermoelectric modules comprising a *p*-type and *n*-type single walled carbon nanotube composite paper // RSC Adv. 2015. Vol. 5. No. 95. Pp. 78099–78103.

137. **Bark H., Lee W., Lee H.** Enhanced thermoelectric performance of CNT thin film *p*/*n* junctions doped with N-containing organic molecules // Macromol. Res. 2015. Vol. 23. No. 9. Pp. 795–801.

138. **Fan P., Zheng Z.-H., Li Y.-Z., et al.** Low-cost flexible thin film thermoelectric generator on zinc based thermoelectric materials // Appl. Phys. Lett. 2015. Vol. 106. No. 7. P. 073901.

139. **Hewitt C. A., Montgomery D. S., Barbalace R. L., et al.** Improved thermoelectric power output from multilayered polyethylenimine doped carbon nanotube based organic composites // J. Appl. Phys. 2014. Vol. 115. No. 18. P. 184502.

140. **We J. H., Kim S. J., Cho B. J.** Hybrid composite of screen-printed inorganic thermoelectric film and organic conducting polymer for flexible thermoelectric power generator // Energy. 2014. Vol. 73. 14 Aug. Pp. 506–512.

141. **Jiao F., Di C.-A., Sun Y., et al.** Inkjet-printed flexible organic thin-film thermoelectric devices based on *p*- and *n*-type poly(metal 1,1,2,2-ethenetetrathiolate)s/polymer composites through ball-milling // Philos. Trans. R. Soc. A. 2014. Vol. 372. No. 2013. P. 20130008.

142. **Lu Z., Layani M., Zhao X., et al.** Fabrication of flexible thermoelectric thin film devices by inkjet printing // Small. 2014. Vol. 10. No. 17. Pp. 3551–3554.

143. **Francioso L., De Pascali C., Farella I., et al.** Flexible thermoelectric generator for ambient assisted living wearable biometric sensors // J. Power Sources. 2011. Vol. 196. No. 6. Pp. 3239–3243.

144. **Bae E. J., Kang Y. H., Jang K.-S., et al.** Solution synthesis of telluride-based nano-barbell structures coated with PEDOT: PSS for spray-printed thermoelectric generators // Nanoscale. 2016. Vol. 8. No. 21. Pp. 10885–10890.

145. **Kirihara K., Wei Q., Mukaida M., Ishida T.** Thermoelectric power generation using nonwoven fabric module impregnated with conducting polymer PEDOT:PSS // Synth. Met. 2017. Vol. 225. Mar. Pp. 41–48.

146. **Varghese T., Hollar C., Richardson J., et al.** High-performance and flexible thermoelectric films by screen printing solution-processed nanoplate crystals // Sci. Rep. 2016. Vol. 6. No. 1. P. 33135.

147. **Du Y., Cai K., Chen S., et al.** Thermoelectric fabrics: Toward power generating clothing // Sci. Rep. 2015. Vol. 5. No. 1. P. 6411.

148. **Ito M., Koizumi T., Kojima H., et al.** From materials to device design of a thermoelectric fabric for wearable energy harvesters // J. Mater. Chem. A. 2017. Vol. 5. No. 24. Pp. 12068–12072.

149. **Weber J., Potje-Kamloth K., Haase F., et al.** Coin-size coiled-up polymer foil thermoelectric power generator for wearable electronics // Sens. Actuators A: Phys. 2006. Vol. 132. No. 1. Pp. 325–330.

150. **Wu Q., Hu J.** A novel design for a wearable thermoelectric generator based on 3D fabric structure // Smart Mater. Struct. 2017. Vol. 26. No. 4. P. 045037.

151. **Owoyele O., Ferguson S., O'Connor B. T.** Performance analysis of a thermoelectric cooler with a corrugated architecture // Appl. Energy. 2015. Vol. 147. 1 Jun. Pp. 184–191.

152. **Fan P., Zheng Z.-H., Cai Z.-K., et al.** The high performance of a thin film thermoelectric generator with heat flow running parallel to film surface // Appl. Phys. Lett. 2013. Vol. 102. No. 3. P. 033904.

153. **Park T., Lim H., Hwang J. U., et al.** Roll type conducting polymer legs for rigid-flexible thermoelectric generator // APL Mater. 2017. Vol. 5. No. 7. P. 074106.

154. **Francioso L., De Pascali C., Bartali R., et al.** PDMS/Kapton interface plasma treatment effects on the polymeric package for a wearable thermoelectric generator // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2013. Vol. 5. No. 14. Pp. 6586–6590.

155. **Zhou W., Fan Q., Zhang Q., et al.** High-performance and compact-designed flexible thermoelectric modules enabled by a reticulate carbon nanotube architecture // Nat. Commun. 2017. Vol. 8. Mar. 24. P. 14886.

156. **Freunek M., Müller M., Ungan T., et al.** New physical model for thermoelectric generators // J. Electron. Mater. 2009. Vol. 38. No. 7. Pp. 1214–1220.

157. **Dames C.** Cost optimization of thermoelectric materials for power generation: The case for ZT at (almost) any cost // Scr. Mater. 2016. Vol. 111. 15 Jan. Pp. 16–22.

158. **Holman J. P.** Heat transfer. 9th ed. New York: McGraw-Hill, 2002. 665 p.

159. **Marconnet A. M., Yamamoto N., Panzer M. A., et al.** Thermal conduction in aligned carbon nanotube–polymer nanocomposites with high packing density // ACS Nano. 2011. Vol. 5. No. 6. Pp. 4818–4825.

160. **Lee J. A., Aliev A. E., Bykova J. S., et al.** Woven-yarn thermoelectric textiles // Adv. Mater. 2016. Vol. 28. No. 25. Pp. 5038–5044.

REFERENCES

1. U.S. Department of Energy., Quadrennial technology review 2015, Technology Assessment 6M: Waste Heat Recovery Systems, DOE Rep. (2015).

2. **Firth A., Zhang B., Yang A.,** Quantification of global waste heat and its environmental effects, Appl. Energy. 235 (1 Feb) (2019) 1314–1334.

3. **Forman C., Muritala I. K., Pardemann R., Meyer B.,** Estimating the global waste heat potential, Renew. Sustain. Energy Rev. 57 (May) (2016) 1568–1579.

4. **Hajlasz M., Helmcke S., Liebach F., et al.,** Waste not: Unlocking the potential of waste heat recovery, McKinsey & Company, Wuqiao, Hebei, China (2023) 1–8.

5. **Kober M.,** The high potential for waste heat recovery in hybrid vehicles: A comparison between the potential in conventional and hybrid powertrains, J. Electron. Mater. 49 (5) (2020) 2928–2936.

6. **Oyedepo S. O., Fakeye B. A.,** Waste heat recovery technologies: Pathway to sustainable energy development, J. Therm. Eng. 7 (1) (2021) 324–348.

7. **Huang K., Yan Y., Li B., et al.,** A novel design of thermoelectric generator for automotive waste heat recovery, Automot. Innov. 1 (1) (2018) 54–61.

8. **Bhakta S., Kundu B.,** A review of thermoelectric generators in automobile waste heat recovery systems for improving energy utilization, Energies. 17 (5) (2024) 1016.

9. **Miao L., Zhu S., Liu C., et al.,** Comfortable wearable thermoelectric generator with high output power, Nat. Commun. 15 (Oct. 02) (2024) 8516.

10. **Olabi A. G.,** Potential applications of thermoelectric generators (TEGs) in various waste heat recovery systems, Int. J. Thermofluids. 16 (Nov) (2022) 100249.

11. **Tang Y., Zhao X., Li Y.,** A novel thermoelectric system for enhancing power generation from waste heat, Energy Convers. Manag. 344 (15 Nov) (2025) 120262.

12. **Xie H., Zhang Y., Gao P.,** Thermoelectric-powered sensors for Internet of things, Micromachines. 14 (1) (2023) 31.

13. **Xiao D., Sun P., Wu J., et al.,** Thermoelectric generator design and characterization for industrial pipe waste heat recovery, Processes. 11 (6) (2023) 1714.

14. **Li G., Yang Y., Xiao Y., et al.,** Flue gas waste heat thermoelectric generator: Laboratory experiment and demonstration application, Case Stud. Therm. Eng. 61 (Sept) (2024) 104953.

15. **Gu Z., He S., Li X., et al.,** Hundred-watt implantable TEG module for large-scale exhaust gas waste heat recovery, Energies. 17 (3) (2024) 665.

16. **Xie W., Weidenkaff A., Tang X., et al.,** Recent advances in nanostructured thermoelectric half-Heusler compounds, Nanomaterials. 2 (4) (2012) 379–412.

17. **Al-Janabi A., Al Salmi O., Alsubhi E., Alhadhrami A.,** Thermoelectric generators as a heat recovery system for exhaust gases of vehicles driving at low speeds, Eng. Technol. J. 41 (1) (2023) 185–195.

18. **Hao Z., Hu R., Gao Y., et al.,** Design and experimental study of a prefabricated building thermoelectric power generation-wall system for severe cold climates, Buildings. 15 (7) (2025) 1076.

19. **Lae Yi Win S., Liao C.-T., Chang H.-Y., Lai C.-M.,** Experimental observations on electricity generation and thermal characteristics of TEG faзades, Energy Build. 294 (1 Sept) (2023) 113225.

20. **Álvarez-Carulla A., Saiz-Vela A., Puig-Vidal M., et al.,** High-efficient energy harvesting architecture for self-powered thermal-monitoring wireless sensor node based on a single thermoelectric generator, Sci. Rep. 13 (1) (2023) 1637.

21. **Lee Y., Park N.,** Self-powered wireless sensor system utilizing a thermoelectric generator for photovoltaic module monitoring application, Sol. Energy. 283 (15 Nov) (2024) 113026.

22. **Yanagisawa R., Koike S., Nawae T., et al.,** Planar-type silicon thermoelectric generator with phononic nanostructures for 100 μW energy harvesting, arXiv preprint arXiv:2307.11382 (2023).

23. **Dimaggio E., Masci A., De Seta A., et al.,** On-chip thermoelectric devices based on standard silicon processing, Small. 20 (51) (2024) 2405411.

24. **Dutt A. S., Pulumati N. B., Deng K., et al.,** High power density micro thermoelectric generators for powering IoTs, Adv. Electron. Mater. 11 (2) (2025) 2400198.

25. **Zhu S.,** Review on wearable thermoelectric generators: From devices to applications, Energies. 15 (9) (2022) 3375.

26. **Lee B., Cho H., Park K. T., et al.,** High-performance compliant thermoelectric generators with magnetically self-assembled soft heat conductors for self-powered wearable electronics, Nat. Commun. 11 (Nov) (2020) 5948.

27. **Yan J.,** Review of micro thermoelectric generator, J. Microelectromech. Syst. 27 (1) (2018) 1–18.

28. **Yang S., Li Y., Deng L., et al.,** Flexible thermoelectric generator and energy management electronics powered by body heat, Microsyst. Nanoeng. 9 (24 Aug) (2023) 106.

29. **He X., Shi X.-L., Wu X., et al.,** Three-dimensional flexible thermoelectric fabrics for smart wearables, Nat. Commun. 16 (14 Mar) (2025) 2523.

30. **Yang D., Shi X.-L., Li M., et al.,** Flexible power generators by Ag_2Se thin films with record-high thermoelectric performance, Nat. Commun. 15 (31 Jan) (2024) 923.

31. **Shwetha M., Lakshmi S.,** Design and analysis of batteryless cardiac pacemaker through combining thermoelectric generators along with DC-DC converter, Int. Trans. Electr. Energy Syst. 31 (12) (2021) e13162.

32. **Choi H., Biswas S., Lang P., et al.,** A current development of energy harvesting systems for energy-independent bioimplantable biosensors, Small. 20 (43) (2024) 2403899.

33. **Rao Y., Voss M., Bechtold T., Hohlfeld D.,** Implantable thermoelectric generator with high aspect ratio thermolegs and integrated voltage converter, Proc. of 2023 IEEE 22nd Int. Conf. on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications (PowerMEMS), Dec. 11–14, 2023; N.Y. Univ. Abu Dhabi (United Arab Emirates), (2023) 206–209.

34. **Hinchet R., Yoon H.-J., Ryu H., et al.,** Transcutaneous ultrasound energy harvesting using capacitive triboelectric technology, Science. 365 (6452) (2019) 491–494.

35. **Sattar M., Lee Y.-J., Kim H., et al.,** Flexible thermoelectric wearable architecture for wireless continuous physiological monitoring, ACS Appl. Mater. Interfaces. 16 (29) (2024) 37401–37417.

36. **Rao Y., Xu C., Voss M., et al.,** Fabrication and characterization of a thermoelectric generator with high aspect ratio thermolegs for electrically active implants, Adv. Mater. Technol. 9 (1) (2024) 2301157.

37. **Zadan M., Wertz A., Shah D., et al.,** Stretchable thermoelectric generators for self-powered wearable health monitoring, Adv. Funct. Mater. 34 (39) (2024) 2404861.

38. **Hu B., Shi X.-L., Zou J., Chen Z.-G.,** Thermoelectrics for medical applications: Progress, challenges, and perspectives, Chem. Eng. J. 437 (1 Jan) (2022) 135268.

39. **O'Brien R. C., Ambrosi R. M., Bannister N. P., et al.,** Safe radioisotope thermoelectric generators and heat sources for space applications, J. Nucl. Mater. 377 (3) (2008) 506–521.

40. **Palaporn D., Tanusilp S.-A., Sun Y., et al.,** Thermoelectric materials for space explorations, Mater. Adv. 5 (13) (2024) 5351–5364.

41. **Ai X., Wu Y., Lyu H., et al.,** High-performance ZrNiSn-based half-Heusler thermoelectrics with hierarchical architectures enabled by reactive sintering, Nat. Commun. 16 (15 Jul) (2025) 6497.

42. **Aridi R., Faraj J., Ali S., et al.,** Thermoelectric power generators: State-of-the-art, heat recovery method, and challenges, Electricity. 2 (3) (2021) 359–386.

43. **Li W., Ghosh S., Liu N., Poudel B.,** Half-Heusler thermoelectrics: Advances from materials fundamental to device engineering, Joule. 8 (5) (2024) 1274–1311.

44. **Young J., Reddy R.,** Processing and thermoelectric properties of TiNiSn materials: A review, J. Mater. Eng. Perform. 28 (10) (2019) 5917–5930.

45. **Min R., Gao Y., Jiang X., et al.,** Enhancement in the thermoelectric performance of ZrNiSn-based alloys through extra Zr-rich nanoprecipitates with superstructures, Chem. Eng. J. 464 (15 May) (2023) 142531.

46. **Wunderlich W., Shinohara Y., Matsumura Y.,** Magnetron sputtering of (TiZr)NiSn thin films on different substrates for thermoelectric applications, J. Phys. Conf. Ser. 379 (1) (2012) 012005.

47. **Douglas J. E., Birkel C. S., Miao M.-S., et al.,** Enhanced thermoelectric properties of bulk TiNiSn via formation of a $TiNi_2Sn$ second phase, Appl. Phys. Lett. 101 (18) (2012) 183902.

48. **Öğüt S., Rabe K. M.,** Band gap and stability in the ternary intermetallic compounds NiSnM (M = Ti, Zr, Hf): A first-principles study, Phys. Rev. B. 51 (16) (1995) 10443–10453.

49. **Halpin J. E., Jenkins B., Moody M. P., et al.,** A correlative study of interfacial segregation in a Cu-doped TiNiSn thermoelectric half-Heusler alloy, ACS Appl. Electron. Mater. 4 (9) (2022) 4446–4454.

50. **Quinn R. J., Bos J.-W. G.,** Advances in half-Heusler alloys for thermoelectric power generation, Mater. Adv. 2 (19) (2021) 6246–6266.

51. **Jain A., Ong S. P., Hautier G., et al.,** Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation, APL Mater. 1 (1) (2013) 011002.

52. **Evers C. B. H., Richter C. G., Hartjes K., Jeitschko W.,** Ternary transition metal antimonides and bismuthides with MgAgAs-type and filled NiAs-type structure, J. Alloys Compd. 252 (1–2) (1997) 93–97.

53. **Villars P., Calvert L. D.,** Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases, Vols 1–3; Ohio (USA): Amer. Soc. for Metals. Materials Park, ASM International, 1991.

54. **Jeitschko W.,** Transition metal stannides with MgAgAs and $MnCu_2Al$ type structure, Metall. Trans. 1 (11) (1970) 3159–3162.

55. **Gürth M., Rogl G., Romaka V. V., et al.,** Thermoelectric high ZT half-Heusler alloys $Ti_{1-x-y}Zr_xHf_yNiSn$ ($0 \le x \le 1$; $0 \le y \le 1$), Acta Mater. 104 (1 Feb) (2016) 210–222.

56. **Murray J. L.,** The Ti–Zr (titanium-zirconium) system, Bull. Alloy Phase Diagr. 2 (2) (1981) 197–201.

57. **Barczak S. A., Quinn R. J., Halpin J. E., et al.,** Suppression of thermal conductivity without impeding electron mobility in *n*-type XNiSn half-Heusler thermoelectrics, J. Mater. Chem. A. 7 (47) (2019) 27124–27134.

58. **Barczak S. A., Halpin J. E., Buckman J., et al.,** Grain-by-grain compositional variations and interstitial metals: A new route toward achieving high performance in half-Heusler thermoelectrics, ACS Appl. Mater. Interfaces. 10 (5) (2018) 4786–4793.

59. **Horton M. K., Huck P., Yang R. X., et al.,** Accelerated data-driven materials science with the materials project, Nat. Mater. 24 (10) (2025) 1522–1532.

60. **Ong S. P., Wang L., Kang B., Ceder G.,** Li–Fe–P–O_2 phase diagram from first principles calculations, Chem. Mater. 20 (5) (2008) 1798–1807.

61. **Larson P., Mahanti S. D., Kanatzidis M. G.,** Structural stability of Ni-containing half-Heusler compounds, Phys. Rev. B. 62 (19) (2000) 12754–12762.

62. **Jia X., Deng Y., Bao X., et al.,** Unsupervised machine learning for discovery of promising half-Heusler thermoelectric materials, npj Comput. Mater. 8 (1) (2022) 34.

63. **Page A.,** Half-Heusler alloys as promising thermoelectric materials (Thesis). University of Michigan, Ann Arbor, Ann Arbor, Michigan (USA), 2017.

64. **Gałązka K., Populoh S., Sagarna L., et al.,** Phase formation, stability, and oxidation in (Ti, Zr, Hf)NiSn half-Heusler compounds, Phys. Status Solidi A. 211 (6) (2014) 1259–1266.

65. **Gandi A. N., Schwingenschlugl U.,** Electron-dominated thermoelectric response in MNiSn (M = Ti, Zr, Hf) half-Heusler alloys, Phys. Chem. Chem. Phys. 18 (20) (2016) 14017–14022.

66. **Dresselhaus M. S.,** Solid state physics. Part II: Optical properties of solids, Lecture Notes (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA). 17 (2001) 15–16.

67. **Zhang X., Zhang P., Xiao C., et al.,** Physical basis of thermal conduction, In book: X. Tian (Ed.). Thermal management materials for electronic packaging: Preparation, characterization, and devices. Wiley-VCH GmbH, Weinheim, Germany (2024) 1–17.

68. **Ptak A. J.,** Principles of molecular beam epitaxy, In book: T. F. Kuech (Ed.), Handbook of crystal growth: Thin films and epitaxy, Elsevier, Amsterdam (2015) 161–192.

69. **Eason R.,** Pulsed laser deposition of thin films: Applications-led growth of functional materials, John Wiley & Sons, London, 2007.

70. **Cherief N., Givord D., Liénard A., et al.,** Laser ablation deposition and magnetic characterization of metallic thin films based on rare earth and transition metals, J. Magn. Magn. Mater. 121 (1–3) (1993) 94–101.

71. **Ohtomo A., Kawasaki M., Sakurai Y., et al.,** Room temperature ultraviolet laser emission from ZnO nanocrystal thin films grown by laser MBE, Mater. Sci. Eng. B. 54 (1–2) (1998) 24–28.

72. **Dijkkamp D., Venkatesan T., Wu X. D., et al.,** Preparation of Y-Ba-Cu oxide superconductor thin films using pulsed laser evaporation from high T_c bulk material, Appl. Phys. Lett. 51 (8) (1987) 619–621.

73. **Willmott P. R.,** Deposition of complex multielemental thin films, Prog. Surf. Sci. 76 (6) (2004) 163–217.

74. **Eason R. W., May-Smith T. C., Grivas C., et al.,** Current state-of-the-art of pulsed laser deposition of optical waveguide structures: Existing capabilities and future trends, Appl. Surf. Sci. 255 (10) (2009) 5199–5205.

75. **Cheung J. T., Sankur H.,** Growth of thin films by laser-induced evaporation, Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 15 (1) (1988) 63–109.

76. **Willmott P. R., Huber J. R.,** Pulsed laser vaporization and deposition, Rev. Mod. Phys. 72 (1) (2000) 315–328.

77. **Jagannadham K., Sharma A. K., Wei Q., et al.,** Structural characteristics of AlN films deposited by pulsed laser deposition and reactive magnetron sputtering: A comparative study, J. Vac. Sci. Technol. A. 16 (5) (1998) 2804–2815.

78. **Rengan A., Biunno N., Narayan J., Moyer P.,** Laser assisted techniques for diamond and diamondlike thin films, MRS Proc. 162 (185) (1989) 185.

79. **Doll G. L., Sell J. A., Taylor C. A. II, Clarke R.,** Growth and characterization of epitaxial cubic boron nitride films on silicon, Phys. Rev. B. 43 (8) (1991) 6816–6819.

80. **Kools J. C. S.,** Pulsed laser deposition of metals, In book: Chrisey D. B., Hubler G. K. (Eds), Pulsed laser deposition of thin films, John Wiley & Sons, New York, 1994.

81. **Kelly R., Miotello A.,** Mechanisms of pulsed laser sputtering, In book: Chrisey D. B., Hubler G. K. (Eds), Pulsed laser deposition of thin films, John Wiley & Sons, New York, 1994.

82. **Webster R. W. H.,** Precise nanoscale characterization of novel Heusler thermoelectrics via analytical electron microscopy, Thesis, University of Glasgow, Glasgow, UK, 2020.

83. **Hopwood J.,** Ionized physical vapor deposition of integrated circuit interconnects, Phys. Plasmas. 5 (5) (1998) 1624–1631.

84. **Rossnagel S. M.,** Sputter deposition for semiconductor manufacturing, IBM J. Res. Dev. 43 (1/2) (1999) 163–179.

85. **Helmersson U., Lattemann M., Bohlmark J., Ehiasar et al.,** Ionized physical vapor deposition (IPVD): A review of technology and applications, Thin Solid Films. 513 (1) (2006) 1–24.

86. **Wang S.-H., Cheng H.-M., Wu R.-J., Chao W.-H.,** Structural and thermoelectric properties of HfNiSn half-Heusler thin films, Thin Solid Films. 518 (21) (2010) 5901–5904.

87. **Heinz S., Angel E. C., Trapp M., et al.,** Phonon bridge effect in superlattices of thermoelectric TiNiSn/HfNiSn with controlled interface intermixing, Nanomaterials. 10 (6) (2020) 1239.

88. **Khayyamifar S., Sadowski G., Hektor J., Music D.,** Amorphous TiNiSn thin films for mechanical flexibility in thermoelectric applications, Thin Solid Films. 807 (30 Oct) (2024) 140534.

89. **Wambach M., Stern R., Bhattacharya S., et al.,** Unraveling self-doping effects in thermoelectric TiNiSn half-Heusler compounds by combined theory and high-throughput experiments, Adv. Electron. Mater. 2 (1) (2016) 1500208.

90. **Jaeger T., Mix C., Schwall M., et al.,** Epitaxial growth and thermoelectric properties of TiNiSn and $Zr_{0.5}Hf_{0.5}NiSn$ thin films, Thin Solid Films. 520 (3) (2011) 1010–1014.

91. **Shu R.,** Nonstoichiometric multicomponent nitride thin films (Thesis, Linköping Studies in Science and Technology. Licentiate Thesis Ser.), Linköping University, Linköping (Sweden), 2020.

92. **Golosov D. A., Melnikov S. N., Dostanko A. P.,** Calculation of the elemental composition of thin films deposited by magnetron sputtering of mosaic targets, Surf. Eng. Appl. Electrochem. 48 (1) (2012) 52–59.

93. **Sieradzka K., Kaczmarek D., Morgiel J., et al.,** Structural properties of transparent Ti-V oxide semiconductor thin films, Open Phys. 11 (2) (2013) 251–257.

94. **Nguyen V. T. A., Smirnova S. P., Savin D. A., et al.,** Magnetron-sputtered Ni and ZrTiNiSn thin films on Si-substrate: Thickness influence on structural property and electrical conductivity. Proc. of 2025 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). 16–17 Oct., St. Petersburg (2025) 303–306.

95. **Sen S., Lake M., Schaaf P.,** Al-based binary reactive multilayer films: Large area freestanding film synthesis and self-propagating reaction analysis, Appl. Surf. Sci. 474 (30 Apr) (2019) 243–249.

96. **Kvashenkina O. E., Gabdullin P. G., Osipov V. S.,** Using the novel capable of SHS-reaction multilayer nanostructured material for soldering of lead-zirconate-titanate piezoceramic elements, J. Phys. Conf. Ser. 1236 (1) (2019) 012023.

97. **Adams D. P., Reeves R. V., Abere M. J., et al.,** Ignition and self-propagating reactions in Al/Pt multilayers of varied design, J. Appl. Phys. 124 (9) (2018) 095105.

98. **Kvashenkina O. E., Udovenko S. A., Osipov V. S., et al.,** Study of long-term post-SHS phase kinetics in Ni/Al reactive multilayer nanofoils, J. Phys. Conf. Ser. 1695 (1) (2020) 012181.

99. **Hu L., Han S., Zhu T., et al.,** P-type dopability in half-Heusler thermoelectric semiconductors, npj Comput. Mater. 11 (1) (2025) 104.

100. **Rogl G., Rogl P. F.,** Development of thermoelectric half-Heusler alloys over the past 25 years, Crystals. 13 (7) (2023) 1152.

101. **Mikami M., Miyazaki H., Nishino Y.,** Enhanced thermoelectric performance by Hf substitution in *p*-type half-Heusler $TiNi_{0.8}Co_{0.2}Sn$, Appl. Phys. Lett. 126 (13) (2025) 133903.

102. **Yang X., Jiang Z., Kang H. J., et al.,** Enhanced thermoelectric performance of $Zr_{1-x}Ta_xNiSn$ half-Heusler alloys by diagonal-rule doping, ACS Appl. Mater. Interfaces. 12 (3) (2020) 3773–3783.

103. **Hołuj P., Euler C., Balke B., et al.,** Reduced thermal conductivity of TiNiSn/HfNiSn superlattices, Phys. Rev. B. 92 (12) (2015) 125436.

104. **Ai X., Lei B., Cichocka M. O., et al.,** Enhancing the thermoelectric properties via modulation of defects in P-type MNiSn-based (M = Hf, Zr, Ti) half-Heusler materials, Adv. Funct. Mater. 33 (48) (2023) 2305582.

105. **Rabin D., Fuks D., Gelbstein Y.,** Al solubility in $(Ti_{1-c}Al_c)NiSn$ half-Heusler alloy, Phys. Chem. Chem. Phys. 21 (14) (2019) 7524–7533.

106. **Wei J., Yang L., Ma Z., et al.,** Review of current high-ZT thermoelectric materials, J. Mater. Sci. 55 (27) (2020) 12642–12704.

107. **Manzoor M., Saxena A., Singh P. K., et al.,** Optoelectronic and thermoelectric properties of zirconium half-Heusler alloys RhZrX (X = P, As, Sb, Bi): An *ab-initio* investigation, J. Inorg. Organomet. Polym. Mater. 35 (3) (2025) 1845–1864.

108. **Quinn R. J., Stenning G. B., Bos J.-W. G.,** Electronic scattering in half-Heusler thermoelectrics from resistivity data, J. Phys. Energy. 4 (2) (2022) 024005.

109. **Allan L., Mulwa W. M., Mwabora J. M., et al.,** An *ab-initio* study of *p*-type ZrCoY (Y = Sb and Bi) half-Heusler semiconductors, Heliyon. 9 (8) (2023) e18531.

110. **Ma H., Yang C.-L., Wang M.-S., et al.,** Effect of M elements (M = Ti, Zr, and Hf) on thermoelectric performance of the half-Heusler compounds MCoBi, J. Phys. D: Appl. Phys. 52 (25) (2019) 255501.

111. **Zhou J. W., Zhu H., Liu T.-H., et al.,** Large thermoelectric power factor from crystal symmetry-protected non-bonding orbital in half-Heuslers, Nat. Commun. 9 (30 Apr) (2018) 1721.

112. **Kang H. B., Saparamadu U., Nozariasbmarz A., et al.,** Understanding oxidation resistance of half-Heusler alloys for in-air high temperature sustainable thermoelectric generators, ACS Appl. Mater. Interfaces. 12 (32) (2020) 36706–36714.

113. **Yu J. J., Fu C. G., Liu Y. T., et al.,** Unique role of refractory Ta alloying in enhancing the figure of merit of NbFeSb thermoelectric materials, Adv. Energy Mater. 8 (1) (2018) 1701313.

114. **Simonson J. W., Wu D., Xie W. J., et al.,** Introduction of resonant states and enhancement of thermoelectric properties in half-Heusler alloys, Phys. Rev. B. 83 (23) (2011) 235211.

115. **Chauhan N. S., Bathula S., Vishwakarma A., et al.,** Vanadium-doping-induced resonant energy levels for the enhancement of thermoelectric performance in Hf-free ZrNiSn half-Heusler alloys, ACS Appl. Energy Mater. 1 (2) (2018) 757–764.

116. **Joshi G., He R., Engber M., et al.,** NbFeSb-based *p*-type half-Heuslers for power generation applications, Energy Environ. Sci. 7 (13 Oct) (2014) 4070–4076.

117. **Fu C., Bai S., Liu Y., et al.,** Realizing high figure of merit in heavy-band *p*-type half-Heusler thermoelectric materials, Nat. Commun. 6 (02 Sept) (2015) 8144.

118. **Zhu H. T., Mao J., Li Y., et al.,** Discovery of TaFeSb-based half-Heuslers with high thermoelectric performance, Nat. Commun. 10 (17 Jan) (2019) 270.

119. **Jäger T.,** Thermoelectric properties of TiNiSn and $Zr_{0.5}Hf_{0.5}NiSn$ thin films and superlattices with reduced thermal conductivities (Thesis). Johannes Gutenberg University Mainz, Mainz (Germany), 2013.

120. **Komar P., Jaeger T., Euler C., et al.,** Half-Heusler superlattices as model systems for nanostructured thermoelectrics, Phys. Status Solidi A. 213 (3) (2016) 732–738.

121. **Zhou Y., Tan Q., Zhu J., et al.,** Thermoelectric properties of amorphous Zr-Ni-Sn thin films deposited by magnetron sputtering, J. Electron. Mater. 44 (6) (2015) 1957–1962.

122. **Kim S.-W., Kimura Y., Mishima Y.,** High temperature thermoelectric properties of TiNiSn-based half-Heusler compounds, Intermetallics. 15 (3) (2007) 349–356.

123. **Van Du N., Tu N., Trung D. Q., et al.,** Effects of the wheel rotation speed during the melt-spinning process on the structural morphology and the thermoelectric properties of $Ti_{0.5}Zr_{0.5}NiSn$ alloy, Vietnam J. Sci. Technol. Eng. 65 (4) (2023) 42–47.

124. **Mesaritis G., Ioannou I., Delimitis A., et al.,** *n*-type (Zr, Ti)NiSn half-Heusler materials via mechanical alloying: Structure, Sb-doping and thermoelectric properties, J. Phys. Chem. Solids. 167 (Aug) (2022) 110735.

125. **Mesaritis G., Kyratsi T.,** Hf incorporation in (Ti, Zr)NiSn half-Heusler solid solutions via mechanical alloying, Energies. 15 (21) (2022) 7885.

126. **Culp S. R., Poon S. J., Hickman N., et al.,** Effect of substitutions on the thermoelectric figure of merit of half-Heusler phases at 800°C, Appl. Phys. Lett. 88 (4) (2006) 042106.

127. **Park G., Lee H. S., Yi S.,** Effects of annealing on the microstructure and thermoelectric properties of half-Heusler MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), J. Electron. Mater. 51 (7) (2022) 3485–3494.

128. **Culebras M., Gymez C. M., Cantarero A.,** Review on polymers for thermoelectric applications, Materials. 7 (9) (2014) 6701–6732.

129. **Kroon R., Mengistie D. A., Kiefer D., et al.,** Thermoelectric plastics: from design to synthesis, processing and structure–property relationships, Chem. Soc. Rev. 45 (22) (2016) 6147–6164.

130. **Chen Y., Zhao Y., Liang Z.,** Solution processed organic thermoelectrics: Towards flexible thermoelectric modules, Energy Environ. Sci. 8 (2) (2015) 401–422.

131. **Gayner C., Kar K. K.,** Recent advances in thermoelectric materials, Prog. Mater. Sci. 83 (Oct) (2016) 330–382.

132. **Elghool A., Basrawi F., Ibrahim T. K., et al.,** A review on heat sink for thermo-electric power generation: Classifications and parameters affecting performance, Energy Convers. Manag. 134 (01 Febr) (2017) 260–277.

133. **Montgomery D. S.,** Coupled thermoelectric and piezoelectric meta structures for renewable energy generation (Ph. D Thesis), Wake Forest University, Winston-Salem, USA, 2016.

134. **Hewitt C. A., Kaiser A. B., Roth S., et al.,** Multilayered carbon nanotube/polymer composite based thermoelectric fabrics, Nano Lett. 12 (3) (2012) 1307–1310.

135. **Kim S. L., Choi K., Tazebay A., Yu C.,** Flexible power fabrics made of carbon nanotubes for harvesting thermoelectricity, ACS Nano. 8 (3) (2014) 2377–2386.

136. **Piao M., Joo M.-K., Choi J. H., et al.,** Evaluation of power generated by thermoelectric modules comprising a *p*-type and *n*-type single walled carbon nanotube composite paper, RSC Adv. 5 (95) (2015) 78099–78103.

137. **Bark H., Lee W., Lee H.,** Enhanced thermoelectric performance of CNT thin film *p*/*n* junctions doped with N-containing organic molecules, Macromol. Res. 23 (9) (2015) 795–801.

138. **Fan P., Zheng Z.-H., Li Y.-Z., et al.,** Low-cost flexible thin film thermoelectric generator on zinc based thermoelectric materials, Appl. Phys. Lett. 106 (7) (2015) 073901.

139. **Hewitt C. A., Montgomery D. S., Barbalace R. L., et al.,** Improved thermoelectric power output from multilayered polyethylenimine doped carbon nanotube based organic composites, J. Appl. Phys. 115 (18) (2014) 184502.

140. **We J. H., Kim S. J., Cho B. J.,** Hybrid composite of screen-printed inorganic thermoelectric film and organic conducting polymer for flexible thermoelectric power generator, Energy. 73 (14 Aug) (2014) 506–512.

141. **Jiao F., Di C.-A., Sun Y., et al.,** Inkjet-printed flexible organic thin-film thermoelectric devices based on *p*- and *n*-type poly(metal 1,1,2,2-ethenetetrathiolate)s/polymer composites through ball-milling, Philos. Trans. R. Soc. A. 372 (2013) (2014) 20130008.

142. **Lu Z., Layani M., Zhao X., et al.,** Fabrication of flexible thermoelectric thin film devices by inkjet printing, Small. 10 (17) (2014) 3551–3554.

143. **Francioso L., De Pascali C., Farella I., et al.**, Flexible thermoelectric generator for ambient assisted living wearable biometric sensors, J. Power Sources. 196 (6) (2011) 3239–3243.

144. **Bae E. J., Kang Y. H., Jang K.-S., et al.,** Solution synthesis of telluride-based nano-barbell structures coated with PEDOT: PSS for spray-printed thermoelectric generators, Nanoscale. 8 (21) (2016) 10885–10890.

145. **Kirihara K., Wei Q., Mukaida M., Ishida T.,** Thermoelectric power generation using nonwoven fabric module impregnated with conducting polymer PEDOT:PSS, Synth. Met. 225 (Mar) (2017) 41–48.

146. **Varghese T., Hollar C., Richardson J., et al.,** High-performance and flexible thermoelectric films by screen printing solution-processed nanoplate crystals, Sci. Rep. 6 (1) (2016) 33135.

147. **Du Y., Cai K., Chen S., et al.,** Thermoelectric fabrics: Toward power generating clothing, Sci. Rep. 5 (1) (2015) 6411.

148. **Ito M., Koizumi T., Kojima H., et al.,** From materials to device design of a thermoelectric fabric for wearable energy harvesters, J. Mater. Chem. A. 5 (24) (2017) 12068–12072.

149. **Weber J., Potje-Kamloth K., Haase F., et al.,** Coin-size coiled-up polymer foil thermoelectric power generator for wearable electronics, Sens. Actuators A: Phys. 132 (1) (2006) 325–330.

150. **Wu Q., Hu J.,** A novel design for a wearable thermoelectric generator based on 3D fabric structure, Smart Mater. Struct. 26 (4) (2017) 045037.

151. **Owoyele O., Ferguson S., O'Connor B. T.,** Performance analysis of a thermoelectric cooler with a corrugated architecture, Appl. Energy. 147 (1 Jun) (2015) 184–191.

152. **Fan P., Zheng Z.-H., Cai Z.-K., et al.,** The high performance of a thin film thermoelectric generator with heat flow running parallel to film surface, Appl. Phys. Lett. 102 (3) (2013) 033904.

153. **Park T., Lim H., Hwang J. U., et al.,** Roll type conducting polymer legs for rigid-flexible thermoelectric generator, APL Mater. 5 (7) (2017) 074106.

154. **Francioso L., De Pascali C., Bartali R., et al.,** PDMS/Kapton interface plasma treatment effects on the polymeric package for a wearable thermoelectric generator, ACS Appl. Mater. Interfaces. 5 (14) (2013) 6586–6590.

155. **Zhou W., Fan Q., Zhang Q., et al.,** High-performance and compact-designed flexible thermoelectric modules enabled by a reticulate carbon nanotube architecture, Nat. Commun. 8 (24 Mar) (2017) 14886.

156. **Freunek M., Müller M., Ungan T., et al.,** New physical model for thermoelectric generators, J. Electron. Mater. 38 (7) (2009) 1214–1220.

157. **Dames C.,** Cost optimization of thermoelectric materials for power generation: The case for ZT at (almost) any cost, Scr. Mater. 111 (15 Jan) (2016) 16–22.
158. **Holman J. P.,** Heat transfer, 9th ed., McGraw-Hill, New York, 2002.
159. **Marconnet A. M., Yamamoto N., Panzer M. A., et al.,** Thermal conduction in aligned carbon nanotube–polymer nanocomposites with high packing density, ACS Nano. 5 (6) (2011) 4818–4825.
160. **Lee J. A., Aliev A. E., Bykova J. S., et al.,** Woven-yarn thermoelectric textiles, Adv. Mater. 28 (25) (2016) 5038–5044.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НГУЕН Ван Ту Ань – *аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург. Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
anh.spbpu@gmail.com
ORCID: 0009-0004-7198-6329

АРХИПОВ Александр Викторович – *доктор физико-математических наук, профессор инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
aarkhipov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3321-7797

ДАО Тхи Ле Зунг – *аспирант Университета Тоямы, г. Тояма, Япония.*
930-0152, Japan, Toyama, Toyama-shi, Sugitami, 2630
dung.dl0609@gmail.com

НГУЕН Хюи Зан – *PhD, заведующий лабораторией Вьетнамской академии наук и технологий, г. Ханой, Социалистическая республика Вьетнам.*
100000, Vietnam, Hanoi, Hoang Quoc Viet St., 18
dannh@ims.vast.ac.vn

НГУЕН Хай Иен – *PhD, научный сотрудник Вьетнамской академии наук и технологий, г. Ханой, Социалистическая республика Вьетнам.*
100000, Vietnam, Hanoi, Hoang Quoc Viet St., 18
yennh@ims.vast.ac.vn

ЛЫОНГ Ван Дыонг – *PhD, научный сотрудник Вьетнамской академии наук и технологий, г. Ханой, Социалистическая республика Вьетнам.*
100000, Vietnam, Hanoi, Hoang Quoc Viet St., 18
duonglv@ims.vast.ac.vn

НГУЕН Минь Туан – *PhD, научный сотрудник Института технологии, г. Ханой, Социалистическая Республика Вьетнам.*
100000, Vietnam, Hanoi, Van Hoi St., 1
tuannm@ims.vast.ac.vn

АРХИПОВ Николай Александрович – *магистрант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nick12arkh@gmail.com

СУНЬ Хайчао – *аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sunhaichao1997@gmail.com

ЛУКША Олег Игоревич – *доктор физико-математических наук, профессор 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

ГАБДУЛЛИН Павел Гарифович – *кандидат физико-математических наук, доцент инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
pavel-gabdullin@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-2519-2577

THE AUTHORS

NGUYEN Van Tu Anh
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
anh.spbpu@gmail.com
ORCID: 0009-0004-7198-6329

ARKHIPOV Alexander V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
aarkhipov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3321-7797

DAO Thi Le Dung
University of Toyama
2630 Sugitami, Toyama-shi, Toyama, 930-0152, Japan
dung.dl0609@gmail.com

NGUYEN Huy Dan
Vietnam Academy of Science and Technology
18 Hoang Quoc Viet St., Hanoi, 100000, Socialist Republic of Vietnam
dannh@ims.vast.ac.vn

NGUYEN Hai Yen
Vietnam Academy of Science and Technology
18 Hoang Quoc Viet St., Hanoi, 100000, Socialist Republic of Vietnam
yennh@ims.vast.ac.vn

LUONG Van Duong
Vietnam Academy of Science and Technology
18 Hoang Quoc Viet St., Hanoi, 100000, Socialist Republic of Vietnam
duonglv@ims.vast.ac.vn

NGUYEN Minh Tuan
Institute of Technology
1 Van Hoi St., Hanoi, 100000, Socialist Republic of Vietnam
tuannm@ims.vast.ac.vn

ARKHIPOV Nikolai A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
nick12arkh@gmail.com

SUN Haichao
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sunhaichao1997@gmail.com

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

GABDULLIN Pavel G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
pavel-gabdullin@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-2519-2577

Статья поступила в редакцию 27.12.2025. Одобрена после рецензирования 10.03.2026. Принята 26.03.2026.
Received 27.12.2025. Approved after reviewing 10.03.2026. Accepted 26.03.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Physical materials technology

Original article
UDC 54.057
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19309

POROSITY CHARACTERISTICS OF ULTRA-HIGH SPECIFIC SURFACE AREA SILICA PARTICLES AT FORMATION STAGES

Z. S. Balysh, D. V. Volodina, S. A. Grudinkin, D. A. Eurov, D. A. Kurdyukov, N. V. Glebova, E. Yu. Stovpiaga ✉

Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

✉ kattrof@gvg.ioffe.ru

Abstract. Spherical micro-mesoporous submicron particles of amorphous silica with a specific surface area (SSA) up to 2050 m^2/g, comparable with that of nanoporous carbon materials, have been synthesized. Particle structure and chemical composition variations were studied by the adsorption porosimetry, thermogravimetric analysis and IR spectroscopy methods at formation stages. Sequential elimination of various organic porogens forming the particles' structure by washing and annealing in different ambients leading to pore opening and corresponding SSA growth were demonstrated. The distinctive feature of the developed post-treatment procedure is the stabilization of the fragile silica backbone due to the formation of a distributed network of surface silanol groups that maintain the achieved characteristics of high porosity.

Keywords: spherical particles, silica, micropores, mesopores, ultra-high specific surface area

Funding: This work was funded by the Russian Science Foundation, project No. 25-23-00189.

For citation: Balysh Z. S., Volodina D. V., Grudinkin S. A., Eurov D. A., Kurdyukov D. A., Glebova N. V., Stovpiaga E. Yu., Porosity characteristics of ultra-high specific surface area silica particles at formation stages, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 116–124. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19309

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

Научная статья
УДК 54.057
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19309

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОРИСТОСТИ ЧАСТИЦ КРЕМНЕЗЕМА СО СВЕРХВЫСОКОЙ УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ НА ЭТАПАХ ФОРМИРОВАНИЯ

З. С. Балыш, Д. В. Володина, С. А. Грудинкин, Д. А. Еуров, Д. А. Курдюков, Н. В. Глебова, Е. Ю. Стовпяга ✉

Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ kattrof@gvg.ioffe.ru

Аннотация. Синтезированы сферические микромезопористые частицы аморфного кремнезема, имеющие удельную поверхность пор до 2050 $м^2/г$. Методами адсорбционной порометрии, термогравиметрического анализа и инфракрасной спектроскопии исследованы изменения структуры частиц и их химического состава на этапах формирования. Показано постепенное исключение из структуры частиц различных органических порообразующих веществ, приводящее к открытию пор и соответствующему увеличению удельной поверхности материала в процессе отмывки и отжига в различных средах.

© Balysh Z. S., Volodina D. V., Grudinkin S. A., Eurov D. A., Kurdyukov D. A., Glebova N. V., Stovpiaga E. Yu., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Отличительной особенностью процедуры постсинтетической обработки является стабилизация хрупкого кремнеземного каркаса за счет взаимодействия поверхностных силанольных групп, сохраняющая достигнутые рекордные характеристики пористости.

Ключевые слова: сферическая частица, кремнезем, микропоры, мезопоры, сверхвысокая удельная поверхность

Финансирование: Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00189.

Для цитирования: Балыш З. С., Володина Д. В., Грудинкин С. А., Еуров Д. А., Курдюков Д. А., Глебова Н. В., Стовпяга Е. Ю. Характеристики пористости частиц кремнезема со сверхвысокой удельной поверхностью на этапах формирования // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 116–124. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19309

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

Introduction

Recently, there has been strong interest in developing porous materials with high specific surface area (SSA). The largest SSA values (typically 1200 – 2300 m^2/g) are observed in nanoporous carbons having subnanometer pores [1]. Nanoporous carbon materials are extensively used in, e.g., hydrogen storage devices, Li-ion batteries, and catalysts. However, numerous chemical processes (e.g., catalytic purification of vehicle exhaust gases) require incombustible supports. In particular, these are synthetic zeolites with an SSA of 400 – 600 m^2/g [2] and mesoporous silicas (M41S family, SBA, etc.) with an SSA of up to 1200 m^2/g [3].

The goal of our study was to obtain high-SSA submicrometer spherical particles of MCM-41 type silica. The large values of SSA (up to 2050 m^2/g) are obtained by addition of various organosilanes and pore-forming substances to the reaction mixture, which act like soft templates and resulted in a formation of an interconnected system of micro- and mesopores within the particles. To determine the composition and structure of the high-SSA particles IR spectroscopy and thermogravimetric analysis (TGA) were used. A post-synthetic modification technique was developed comprising washing and annealing stages to stabilize the fragile silica backbone by formation of a distributed network of surface silanol groups and preserve the achieved high porosity characteristics. We believe that the obtained material, which combines all the benefits of silica (hydrophilicity, large number of functional groups, thermal and chemical stability) with a huge specific surface area comparable with that in nanoporous carbon will have significant impact for the processes, where the effectiveness of the materials used directly depends on the extent of available surface and the number of active centers, such as catalysis, sorption, separation.

Experimental

The high-SSA SiO_2 particles were obtained in a water-ethanol-ammonia mixture containing dissolved cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) by joint hydrolysis of tetraethoxysilane (TEOS) and 3-methacryloxypropyltrimethoxysilane (MPTMOS) [4, 5]. The reagents

$$\text{MPTMOS} : \text{TEOS} : NH_3 : H_2O : C_2H_5OH : \text{CTAB}$$

were taken in molar ratio of 1 : 3 : 240 : 3120 : 1250 : 0.4, respectively. TEOS+MPTMOS were introduced 10 min after the beginning of a vigorous stirring of the rest of the components. The temperature of the reaction mixture was 42°C. The synthesis of particles was carried out for 5 hrs. under stirring at 200 r.p.m. The as-synthesized particles were treated as follows:

Option No. 1. The particles were washed once in the ethanolic solution (0.01 M) of HCl at a temperature of 70°C for 2 hrs. Then the material was annealed at 350ºC in air for 2 hrs.

Option No. 2. The particles were washed in the ethanolic solution (0.01 M) of HCl at a temperature of 70°C for 2 hrs. Then they were collected by centrifugation and washed once more at the above conditions. The washed particles were dried at ambient conditions.

© Балыш З. С., Володина Д. В., Грудинкин С. А., Еуров Д. А., Курдюков Д. А., Глебова Н. В., Стовпяга Е. Ю., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Option No. 3. The particles were washed twice in the ethanolic solution (0.01 M) of HCl at a temperature of 70°C as described above (Variant No. 2). Then the resulting material was annealed at 350ºC in air for 2 hrs.

Option No. 4. The particles were washed twice in the ethanolic solution (0.01 M) of HCl at a temperature of 70°C as described in Variant No. 2. Then the particles were preliminary annealed at 350ºC in air for 2 hrs. After that the final annealing at 430 °C in air for 5 hrs. was carried out.

Option No. 5. The particles were washed twice in the ethanolic solution (0.01 M) of HCl at a temperature of 70°C as described in Variant No. 2. Then the particles were preliminary annealed at 350ºC in air for 2 hrs. After that the final annealing at 430 °C in a flow of oxygen for 5 hrs. was carried out. The oxygen supply system was equipped with a U-tube filled with bidistilled deionized water. As a result, the gas supplied to the reactor contained water vapor (H_2O content ~20 g/m^3).

The adsorption structural analysis was carried out on a 3FLEX analyzer (Micromeritics, USA) with the use of gaseous nitrogen and argon as adsorbates at 77 K. SSA, pore volume and pore size distribution (PSD) were calculated using the built-in software of the analyzer. At 77 K, nitrogen has a saturation pressure of 760 Torr, whereas argon has the one of 200 Torr. The Brunauer – Emmet – Teller (BET) SSA value for N_2 isotherms was determined in the relative pressure range between 0.06 and 0.20. This range provided a correlation coefficient of at least 0.999. In the case of Ar isotherms, the "standard" relative pressure range for BET (0.05–0.30) was chosen, since a correlation coefficient above 0.99 could not be achieved. The total pore volume V_p of samples was determined at the relative pressure $P/P_0 \rightarrow 0.991$. An analysis of SSA, pore volume and pore size distribution was also carried out by the NLDFT method [6] for pillared clay in the case of N_2 adsorption branch and for Ar77@Zeolite, H-Form in the case of Ar adsorption branch. The model was chosen in such a way that the minimum value of RMS error (< 4 cm^3/g) was achieved. Non-negative regularization values were 0.3 and 0.2 for N_2 and Ar isotherms, correspondingly.

Thermogravimetric analysis (TGA) and differential scanning calorimetry (DSC) study were performed using a TGA/DSC1 analyzer (Mettler-Toledo, Switzerland) with a heating rate 10 ºC/min. FTIR spectra were measured using an IFS 113v spectrometer (Bruker, USA).

Results and discussion

The goal of the post-synthetic treatment was mild organic removal, to form pores in place of organic groups and prevent polycondensation or other damage of the silica framework, but rather to stabilize it. Removal of organics was carried out in three stages: washing, pre-annealing and final annealing. Most of the CTAB was removed on the first stage involving washing the particles in an alcoholic solution (0.01 M) of HCl at 70°C (see Figs.1, 2).

Then, a preliminary annealing was carried out at 350°C in air. At the final stage, the particles were annealed at 430°C in a flow of oxygen containing saturated water vapor. The post-synthetic treatment of the particles under the above-described conditions provided the formation of silica with the maximum BET SSA (see Fig. 3 and Table). The obtained particles had submicron size (their average diameter was 450 nm) and spherical shape (see inset in Fig.4, *b*).

According to FTIR results, at different stages of post-synthetic treatment of particles (washing, annealing) various organic moieties were gradually removed [7 – 9], which was accompanied with an increase in the amount of adsorbed water and silanol groups. The as-synthesized silica particles contain various associates of CTA and MP groups (see curve *1* in Fig. 1). Along with the vibrational mode's characteristic of silica [7], there are bands corresponding to vibrations of $N-CH_3$ groups (characteristic of CTAB [8]), C–O, C=O and C=C groups (present in MPTMOS [9]). After the washing step, the spectrum of particles (see curve *2* in Fig. 1) contains almost no bands corresponding to methylammonium ($N-CH_3$) group vibrations in the CTAB molecule and the intensity of vibrational modes of methylene groups ($-CH_2$) prevailing in CTAB significantly decreases, which confirms almost complete removal of CTAB moieties from the particles. The presence of the bands corresponding to C–H, $-CH_2$ and $-CH_3$ vibrations is caused by that MPTMOS, which remains within particles after CTAB washing, contains these groups. A broad band at 3450 cm^{-1} corresponding to –OH stretching vibrations in hydrogen-bound molecules of physically adsorbed water [7] becomes more pronounced indicating that some pores turn out to be accessible to water after CTAB elimination. After annealing of particles at 350°C in air, the bands corresponding to atomic vibrations in organic molecules almost completely disappeared

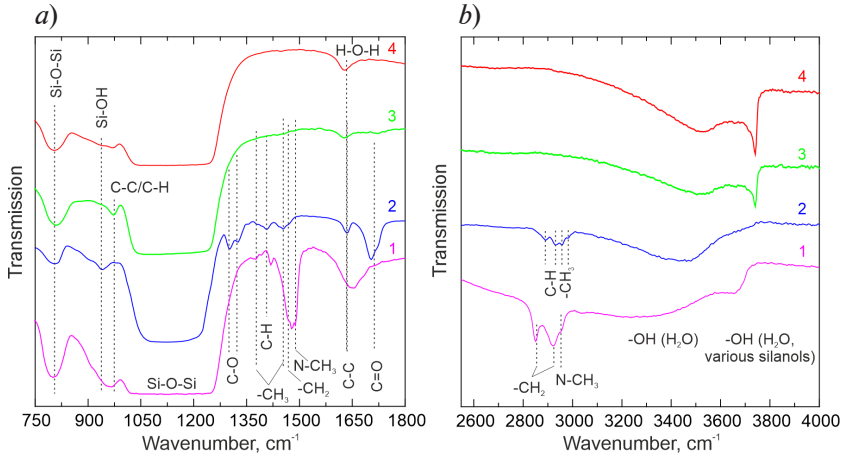


Fig. 1. FTIR spectra in the wavenumber ranges of 750 – 1800 cm^{-1} (*a*) and 2575 – 4000 cm^{-1} (*b*) for the high-SSA SiO_2 particles just after synthesis (curves *1*) and after different post-treatment routes (*2* – *4*): Option No. 2 (*2*), Option No. 3 (*3*), Option No. 5 (*4*). Characteristic bands are designated

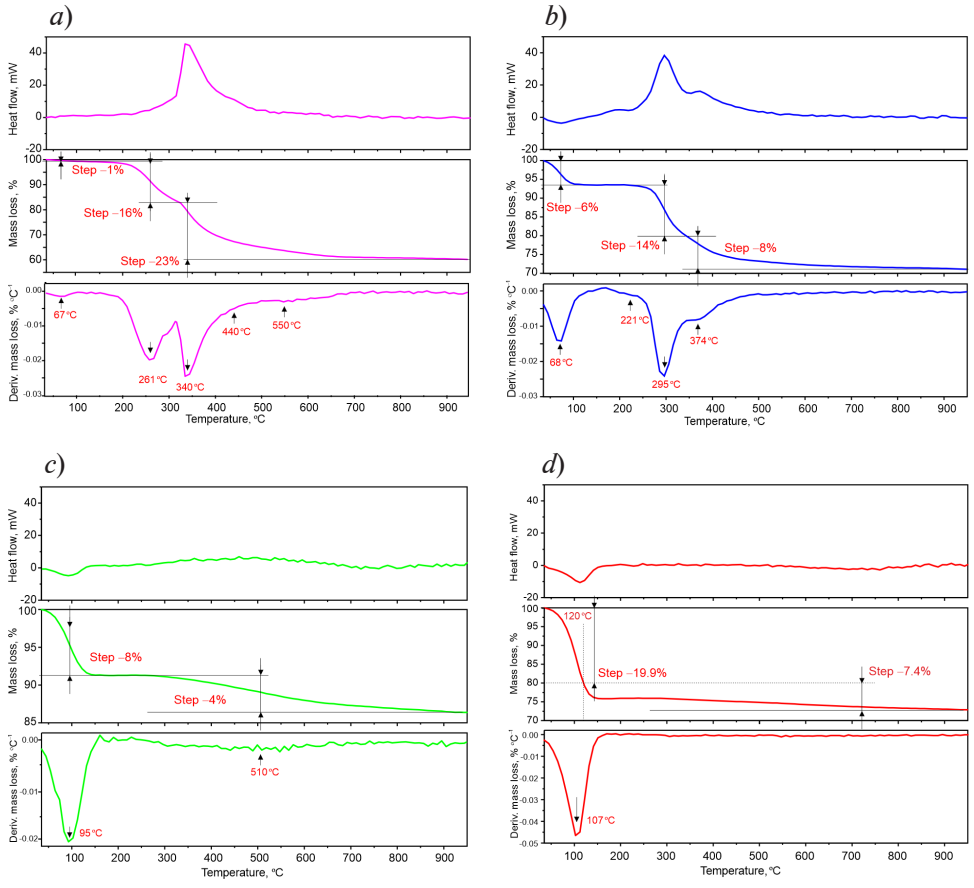


Fig. 2. DSC, TG and DT curves (from top to bottom in each panel) for the high-SSA SiO_2 particles just after synthesis (*a*) and after different post-treatment routes (*b* – *d*): Option No. 2 (*b*); Option No. 3 (*c*); Option No. 5 (*d*). Characteristic mass loss steps are marked.

(see curve *3* in Fig. 1). A broad band in the range 3500 – 3800 cm^{-1} appears, which corresponds to vibrations of various types of silanol groups. According to FTIR, the particles finally annealed in wet oxygen contain the largest number of single and geminal silanols and no organic groups (see curve *4* in Fig. 1).

There are features on DSC, TG and differential thermal (DT) curves of as-synthesized and washed particles (see Fig. 2, *a*, *b*) determined by thermal decomposition of CTA [10] and MP [11] groups, correspondingly. Note, that the as-synthesized particles contain almost no physically adsorbed water (see Fig. 2, *a*). Its content increases from stage to stage of post-synthetic treatment and reaches 20% of sample mass after final annealing in oxygen, which correlates with the FTIR results (see Fig. 1). Moreover, the temperature of the adsorbed water removal increases from 67 to 107°C (see Fig. 2, *b* – *d*), which is caused by the formation of hydrogen bonds between molecules of H_2O and Si–OH groups. At the same time, the mass of organics gradually decreased and after preliminary annealing at 350°C its value became less than 4% (see Fig. 2, *c*) since the observed step in the temperature range of 300 – 950°C is associated not only with the oxidation of organics, but also with the removal of surface silanols (the contents of absorbed and chemically bonded water are presented in Table).

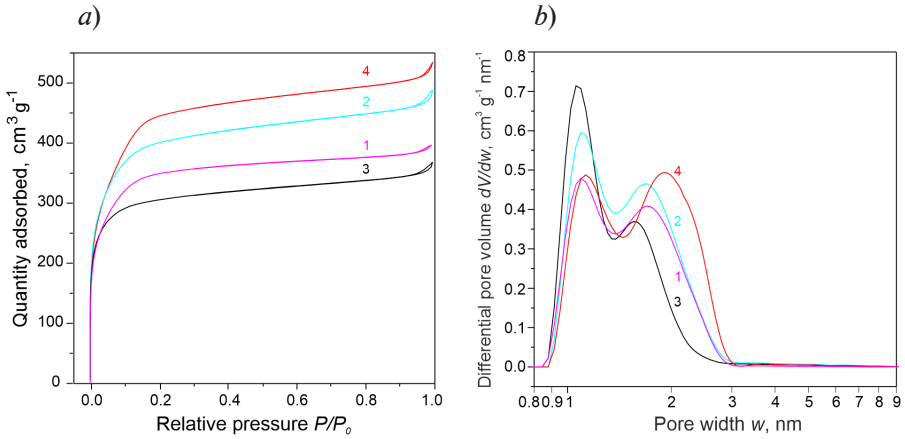


Fig. 3. Adsorption isotherms of gaseous N_2 (77 K) (*a*) and NLDFT PSD (*b*) for the high-SSA SiO_2 particles after different post-treatment procedures: Option No. 1 (curves *1*); Option No. 3 (*2*); Option No. 4 (*3*); Option No. 5 (*4*)

Table

Porosity characteristics of particles and the content of adsorbed and chemically bonded water at the different stages of organic removal

Posttreatment (Option No.)	Adsorbate	SSA, m^2/g		V_p, cm^3/g (at P/P_0 = 0.991)	Physisorbed water (TGA)		OH group content at 950°C (TGA)	
		BET	DFT		mmol/g	$H_2O/(nm)^2$	mmol/g	$OH/(nm)^2$
1	N_2	1335	1423	0.61	–			
3		1516	1644	0.76	4.4	1.8	4.4	1.9
4		1137	1382	0.57	–			
5		1713	1785	0.83	11.1	3.9	8.2	3.6
5	Ar	2057	2035	0.70	11.1	3.2	8.2	3.0

Notations: V_p is the total pore volume, P/P_0 is the relative pressure; SSA is the Specific Surface Area, BET is the Brunauer – Emmet – Teller method; DFT is the Density Functional Theory; TGA is the thermogravimetric analysis. Footnote: The amount of sorbed water and the number of OH groups, in mmol/g, (see the 2 right columns of the Table) were determined from the TG curves by the value of mass loss in temperature ranges of 35 – 120°C and 120 – 950°C respectively.

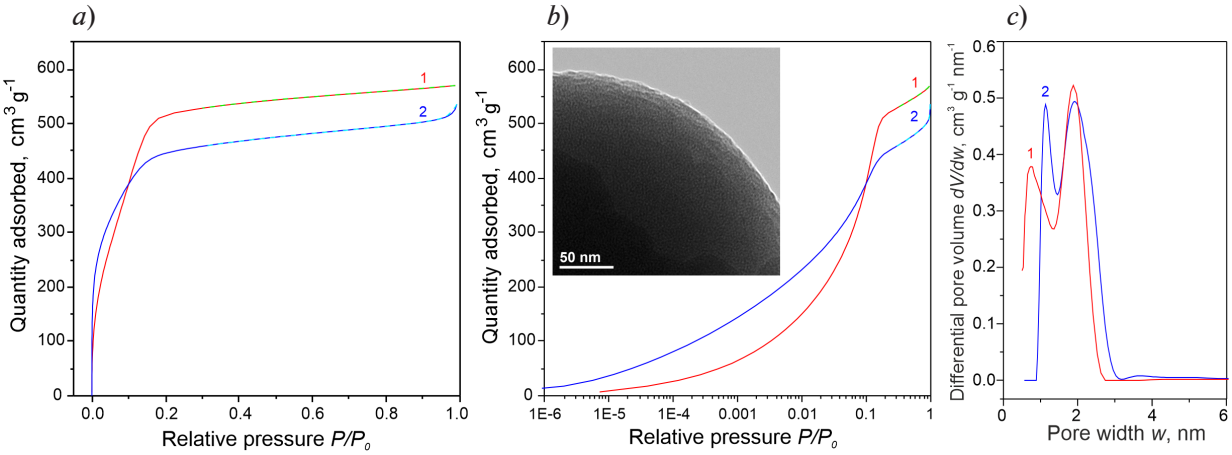


Fig. 4. Adsorption isotherms (77 K) in 2 scales: linear (*a*) and logarithmic (*b*), as well as NLDFT PSD (*c*) for the high-SSA SiO_2 particles. Gaseous adsorbate used: Ar (*1*) and N_2 (*2*). *Inset*: a micrograph of the particle

The stepwise isotherms of N_2 and Ar adsorption (see Fig. 3, *a*) belong to type IV [12] and are characteristic of M41S materials. The values of the SSA and pore volume of the particles are summarized in Table. Note, that two-fold washing leads to higher porosity, likely due to almost complete removal of CTAB molecules. This indicates that the temperature of the final annealing 430°C was optimal, lower temperatures would not have been able to provide a complete oxidation of all the organics (see Figs. 1, 2), while higher temperatures led to the sintering of the material and collapse of the pores. The composition of the gas mixture is also important. In particular, the final annealing at 430°C in air drastically decrease SSA value of the particles (see Fig. 3 and Table). The above-mentioned annealing without water possibly leads to a significant loss of hydroxyl (silanol) groups due to their polycondensation with the subsequent formation of −Si−O−Si− bonds. As a consequence, the pore walls became thicker and the porosity of the material decreased. The addition of saturated water vapor to oxygen during annealing was accompanied by a jump in the SSA values (see Fig. 4), which was caused by high content of surface silanols that came to replace the organics that stabilized the structure before. Taking the above into the account, the Option No. 5 of the post-treatment route is the optimal.

Summary

Submicrometer spherical micro-mesoporous SiO_2 particles with external diameter of 450 nm have been synthesized with a specific surface area of up to 2050 m^2/g, comparable with that of nanoporous carbon materials. The particles have two pore subsystems: micropores and mesopores with relatively broad size distributions and two pronounced maxima: at ~1.2 and 1.9 nm respectively. We suggest that the smallest 0.5 nm micropores may be located inside the framework of silica-oxygen tetrahedra, what could explain such a large value of the specific surface area. The mild post-treatment procedure we developed included several washing and annealing stages and allowed forming the micro- and mesopores in the place of various organic groups, preventing polycondensation or other damage of the silica framework and its stabilization with surface silanol groups.

Acknowledgments

The authors thank Dr. D. A. Kirilenko (Ioffe Institute), for transmission electron microcopy measurements.

The microscopic study was carried out on equipment of the Federal Joint Research Center “Material Science and Characterization in Advanced Technology”.

REFERENCES

1. **Gogotsi Y., Presser V.,** Carbon nanomaterials, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 2013.

2. **Breck D.W.,** Zeolite molecular sieves: structure, chemistry, and use. Wiley, 1973.

3. **Zhao D., Wan Y., Zhou W.,** Ordered mesoporous materials, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey (USA), 2013.

4. **Mastalieva V. A., Neplokh V. V., Aybush A. V., et al.,** Nonlinear optical phenomena in mesoporous SiO_2 and Si/SiO_2 nanoparticles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3.2) (2024) 207–211.

5. **Eurov D. A., Kurdyukov D. A., Medvedev A. V., et al.,** Micro-mesoporous submicron silica particles with pore size tunable in a wide range: Synthesis, properties and prospects for LED manufacturing, Nanotechnol. 32 (21) (2021) 215604.

6. **Olivier J. P., Occelli M. L.,** Surface area and microporosity of a pillared interlayered clay (PILC) from a hybrid density functional theory (DFT) method, J. Phys. Chem. B. 105B (22) (2001) 5358–5358.

7. **Innocenzi P.,** Infrared spectroscopy of sol-gel derived silica-based films: A spectra-microstructure overview, J. Non-Cryst. Solids. 316 (2–3) (2003) 309–319.

8. **Lin-Vien D., Colthup N. B., Fateley W. G., Grasselli J. G.,** The handbook of infrared and Raman characteristic frequencies of organic molecules, Academic Press, San Diego, California (USA), 1991.

9. **Gutiérrez-Becerra A., Barcena-Soto M., Soto V., et al.,** Structure of reverse microemulsion-templated metal hexacyanoferrate nanoparticles, Nanoscale Res. Lett. 7 (20 Jan) (2012) 83.

10. **Kleitz F., Schmidt W., Schüth F.,** Calcination behavior of different surfactant-templated mesostructured silica materials, Microporous Mesoporous Mater. 65 (1) (2003) 1–29.

11. **Pellice S., Galliano P., Castro Y., Durán A.,** Hybrid sol-gel coatings produced from TEOS and γ-MPS, J. Sol-Gel Sci. Technol. 28 (1) (2003) 81–86.

12. **Gregg S. J., Sing K. S. W.,** Adsorption, surface area and porosity. 2nd ed. Academic Press, London, 1982.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Gogotsi Y., Presser V.** Carbon nanomaterials. 2nd edition. Boca Raton, Florida (USA): CRC Press, 2013. 529 p.

2. **Брек Д.** Цеолитовые молекулярные сита. Пер. с англ. М.: Мир, 1976. 782 с.

3. **Zhao D., Wan Y., Zhou W.** Ordered mesoporous materials. Hoboken, New Jersey (USA): John Wiley & Sons, Inc., 2013. 523 p.

4. **Mastalieva V. A., Neplokh V. V., Aybush A. V., et al.,** Nonlinear optical phenomena in mesoporous SiO_2 and Si/SiO_2 nanoparticles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2024. Vol. 17. No. 3.2. Pp. 207–211.

5. **Eurov D. A., Kurdyukov D. A., Medvedev A. V., Kirilenko D. A., Tomkovich M. V., Golubev V. G.** Micro-mesoporous submicron silica particles with pore size tunable in a wide range: synthesis, properties and prospects for LED manufacturing // Nanotechnology. 2021. Vol. 32. No. 21. P. 215604.

6. **Olivier J. P., Occelli M. L.** Surface area and microporosity of a pillared interlayered clay (PILC) from a hybrid density functional theory (DFT) method // The Journal of Physical Chemistry B. 2001. Vol. 105B. No. 22. Pp. 5358–5358.

7. **Innocenzi P.** Infrared spectroscopy of sol-gel derived silica-based films: a spectra-microstructure overview // Journal of Non-Crystalline Solids. 2003. Vol. 316. No. 2–3. Pp. 309–319.

8. **Lin-Vien D., Colthup N. B., Fateley W. G., Grasselli J. G.** The handbook of infrared and Raman characteristic frequencies of organic molecules. San Diego, California (USA): Academic Press, 1991. 503 p.

9. **Gutiérrez-Becerra A., Barcena-Soto M., Soto V., Arellano-Ceja J., Casillas N., Prévost S., Noirez L., Gradzielski M., Escalante J.** Structure of reverse microemulsion-templated metal hexacyanoferrate nanoparticles // Nanoscale Research Letters. 2012. Vol. 7. 20 January. P. 83.

10. **Kleitz F., Schmidt W., Schüth F.** Calcination behavior of different surfactant-templated mesostructured silica materials // Microporous and Mesoporous Materials. 2003. Vol. 65. No. 1. Pp. 1–29.

11. **Pellice S., Galliano P., Castro Y., Durán A.** Hybrid sol-gel coatings produced from TEOS and γ-MPS // Journal of Sol-Gel Science and Technology. 2003. Vol. 28. No. 1. Pp. 81–86.

12. **Грег С. Д.** Адсорбция, удельная поверхность, пористость. Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 407 с.

THE AUTHORS

BALYSH Zoya S.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
balyshzoe@gmail.com
ORCID: 0009-0001-1698-9162

VOLODINA Daria V.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
dasha13129@gmail.com
ORCID: 0009-0009-4336-0712

GRUDINKIN Sergey A.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
grudink@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1344-9483

EUROV Daniil A.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
edan@mail.ru
ORCID: 000-0002-7471-4028

KURDYUKOV Dmitry A.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
kurd@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0002-3041-9609

GLEBOVA Nadezhda V.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
Glebova@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4519-0111

STOVPIAGA Ekaterina Yu.
Ioffe Institute
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
kattrof@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-0434-5252

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАЛЫШ Зоя Сергеевна – *лаборантка лаборатории физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
balyshzoe@gmail.com
ORCID: 0009-0001-1698-9162

ВОЛОДИНА Дарья Владимировна – *лаборантка лаборатории физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
dasha13129@gmail.com
ORCID: 0009-0009-4336-0712

ГРУДИНКИН Сергей Александрович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
grudink@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1344-9483

ЕУРОВ Даниил Александрович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
edan@mail.ru
ORCID: 0000-0002-7471-4028

КУРДЮКОВ Дмитрий Александрович – *кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
kurd@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0002-3041-9609

ГЛЕБОВА Надежда Викторовна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории мощных полупроводниковых приборов Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Glebova@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4519-0111

СТОВПЯГА Екатерина Юрьевна – *кандидат химических наук, заведующая лабораторией физики аморфных полупроводников Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
kattrof@gvg.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-0434-5252

Received 17.02.2026. Approved after reviewing 21.04.2026. Accepted 21.04.2026.
Статья поступила в редакцию 17.02.2026. Одобрена после рецензирования 21.04.2026. Принята 21.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Ядерная физика

Научная статья
УДК 539.126.3, 539.126.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19310

ВОЗМОЖНОСТИ ИЗМЕРЯТЬ СВОЙСТВА $K^*(892)^0$-РЕЗОНАНСА И φ(1020)-РЕЗОНАНСА В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР КСЕНОНА С НЕПОДВИЖНОЙ ВОЛЬФРАМОВОЙ МИШЕНЬЮ ПРИ ЭНЕРГИИ 2,5*A* ГэВ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ MPD

Я. А. Бердников [1], Д. А. Иванищев [1, 2] ✉, Д. О. Котов [1], М. В. Малаев [1], Ю. Г. Рябов [2]

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

[2] Петербургский институт ядерной физики имени Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

✉ ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru

Аннотация. В работе исследованы возможности измерять свойства $K^*(892)^0$-резонанса и φ(1020)-резонанса в столкновениях ядер ксенона Xe с неподвижной мишенью из вольфрама W при кинетической энергии налетающего пучка $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ с помощью экспериментальной установки (ЭУ) MPD на ускорителе NICA. Получены оценки массового разрешения ЭУ MPD, эффективности регистрации в ЭУ MPD и спектров по поперечному импульсу для исследуемых резонансов. Оценки вычислены как зависимости от поперечного импульса для различных интервалов по центральности столкновений Xe + W в центральной области быстрот посредством модельных расчетов. Резонансы восстанавливались в каналах распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ и $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$. Использовался подход на основе σ-параметризации информации об идентификации дочерних частиц в ЭУ MPD.

Ключевые слова: столкновение ядер, рождение, адронный резонанс, ускоритель NICA, детектор MPD

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов Ю. Г. Возможности измерять свойства $K^*(892)^0$-резонанса и φ(1020)-резонанса в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5*A* ГэВ в эксперименте MPD // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 125–138. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19310

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19310

THE POSSIBILITIES OF MEASURING THE PROPERTIES OF NEUTRAL $K^*(892)^0$ AND φ(1020) RESONANCES IN COLLISIONS OF XENON NUCLEI WITH A FIXED TUNGSTEN TARGET AT AN ENERGY OF 2.5*A* GeV IN THE MPD EXPERIMENT

Ya. A. Berdnikov [1], D. A. Ivanishchev [1, 2] ✉, D. O. Kotov [1], M. V. Malaev [1], Yu. G. Riabov [2]

© Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов Ю. Г., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;
[2] Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», St. Petersburg, Russia
✉ ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru

Abstract. We report the study results of possibilities of measuring the properties of $K^*(892)^0$ and φ(1020) resonances in collisions of Xe nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV using the MPD detector at the NICA collider. The evaluations of the mass resolution, detection efficiency of the MPD detector and the transverse momentum spectra for the studied resonances were made. The evaluations were obtained depending on the transverse momentum for different intervals of centrality of Xe + W collisions in the central rapidity range using model calculations. The resonances were reconstructed in the $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ and $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ decay channels. We used an approach based on σ-parameterization of daughter particle identification information in the MPD detector.

Keywords: nuclei collision, production, hadron resonance, NICA collider, MPD detector

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V., Riabov Yu. G., The possibilities of measuring the properties of $K^*(892)^0$ and φ(1020) resonances in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV in the MPD experiment, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 125–138. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19310

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

Введение

Изучение экстремальных состояний адронной материи, возникающих при взаимодействиях релятивистских тяжелых ионов, остается ключевой и актуальной задачей современной физики элементарных частиц. Многолетние исследования на крупнейших мировых коллайдерах и ускорителях, таких как американский Релятивистский коллайдер тяжелых ионов (РИК), работающий на базе Брукхейвенской национальной лаборатории, а также Протонный суперсинхротрон (СПС) и международный Большой адронный коллайдер (БАК) в Европейской организации по ядерным исследованиям (ЦЕРН) позволили доказать существование нового агрегатного состояния вещества, экстремального агрегатного состояния квантово-хромодинамической материи – сильновзаимодействующей кварк-глюонной плазмы (КГП) [1]. Оказалось, что КГП проявляет признаки идеальной жидкости. Экспериментально доказано, что сильновзаимодействующая КГП ведет себя не как газ свободных частиц, а как идеальная жидкость с экстремально низкой вязкостью. Образующаяся ядерная среда не просто разлетается подобно набору независимых частиц, а расширяется и остывает как единая макроскопическая система. Динамика реакции характеризуется сильными коллективными эффектами, включая продольное и поперечное (радиальное) расширение файербола.

Эволюцию и динамику такой плазмы исследователи успешно описывают с помощью гидродинамических моделей, предполагающих достижение системой локального теплового равновесия, и используют специфические начальные условия. Образование КГП приводит к изменению химического состава среды. Одним из главных наблюдаемых признаков действительного образования КГП выступает избыточный выход странных частиц, по сравнению с реакциями, где КГП не возникает. КГП образуется исключительно в условиях крайне высоких температур и высоких значений барионной плотности. Однако на экспериментах с высочайшими энергиями столкновений тяжелых ядер сканируют область фазовой диаграммы сильновзаимодействующей квантовохромодинамической

© Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V., Riabov Yu. G., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

материи, которая характеризуется высокими температурами и практически нулевой барионной плотностью. В то же время наиболее интересная часть фазовой диаграммы (где ожидается обнаружение критической точки и фазового перехода первого рода) расположена в секторе с умеренными температурами и со значительной барионной плотностью. Эта область соответствует энергиям столкновения ядер $\sqrt{S_{NN}} = 2 - 15$ ГэВ.

Исследование указанного сектора фазовой диаграммы и является основополагающей задачей сверхпроводящего коллайдера протонов и тяжелых ионов (*англ.* Nuclotron based Ion Collider fAcility (NICA)) в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) в городе-наукограде Дубне Московской области. На ускорительном комплексе NICA в ближайшее время планируется начать эксперимент MPD (*англ.* Multi-Purpose Detector), нацеленный на анализ ядерной материи, для которой характерны невысокие температуры (10 – 100 МэВ) и барионные плотности, превышающие плотность обычного ядерного вещества в 5 – 10 раз [2].

Для детального сканирования области высоких значений барионной плотности и умеренной температуры фазовой диаграммы эксперименты обычно проводят с применением неподвижной мишени. В режиме сталкивающихся пучков ускорителя, при снижении энергии пучков критически падает светимость, что делает набор данных продолжительным по времени. Использование фиксированной мишени решает эту проблему. Примером эффективного применения такого подхода является реализация неподвижной мишени в эксперименте с соленоидальным трековым детектором (*англ.* Solenoidal Tracker At RHIC (STAR)) на ускорителе RHIC [3]. Внедрение неподвижной мишени внутрь пучковой трубы ускорителя RHIC позволило в эксперименте STAR обойти ограничения по светимости на малых энергиях и собрать необходимую выборку столкновений ядер. Применение неподвижной мишени позволило существенно расширить возможности программы сканирования по энергии событий столкновения ядер [3]. Энергия столкновений была понижена вплоть до $\sqrt{S_{NN}} = 3$ ГэВ. Вопреки результатам исследований в эксперименте STAR, прямых доказательств существования искомой критической точки и фазового перехода первого рода пока не было зафиксировано. Подобно эксперименту STAR, эксперимент MPD предусматривает проведение исследований как при столкновении встречных пучков в ускорителе, так и при взаимодействии одного из пучков с неподвижной мишенью. Набор данных в режиме с неподвижной мишенью позволит эксперименту MPD набрать достаточно масштабный набор экспериментальных данных за относительно короткие сеансы работы.

Эволюцию плотной и/или горячей ядерной среды, образующейся в столкновениях тяжелых релятивистских ядер, от состояния КГП до газа адронов исследуют косвенно, анализируя только свойства частиц, зарегистрированных детекторными устройствами. В связи с этим короткоживущие адронные резонансы представляют собой уникальный инструмент определения ряда характеристик ядерной среды [4 – 6]. Время жизни резонансов сопоставимо с длительностью финального этапа эволюции системы – адронной фазы, что позволяет эффективно использовать резонансы для определения плотности и времени жизни адронного газа, формирующегося в адронной фазе. Измерение инвариантных спектров и выходов таких резонансов, как $K^*(892)^0$ и $\varphi(1020)$, – это важнейший и уникальный ключ к пониманию микроскопических процессов в расширяющемся файерболе. Рассматриваемые мезоны обладают радикально различающимися временем жизни и сходным кварковым составом, что делает их идеальной парой для сравнительного анализа. Резонанс $K^*(892)^0$ состоит из d- и $\bar{s}$ -кварков и обладает открытой странностью и малым временем жизни, равным 3,8 фм/c [7]. В столкновениях тяжелых релятивистских ядер длительность стадии адронного газа (от момента химической до момента кинетической заморозки она составляет около 10 фм/c [8]) превышает это значение. В результате подавляющее большинство рожденных $K^*(892)^0$-резонансов распадается прямо внутри адронного газа. Дочерние частицы распада

$$K^*(892)^0 \rightarrow K^+ + \pi^-$$

с высокой вероятностью рассеиваются на других адронах среды, меняя траекторию движения или импульс. В итоге теряется кинематическая корреляция и свойства родительских резонансов восстанавливаются неверно. При сравнении отношений выходов

$K^*(892)^0$-резонансов к выходам долгоживущих адронов с таким же кварковым составом наблюдается подавление выхода резонансов. Если измерять степень этого подавления, то можно получить также плотность и продолжительность адронной фазы [8].

Резонанс φ(1020) является легким векторным мезоном, он состоит из s-кварка и $\overline{s}$ -кварка и представляет собой частицу со скрытой странностью. Данное свойство выводит φ(1020)-мезон из-под влияния канонического подавления, делая его ключевым объектом для анализа процессов образования странности [4]. Для уточнения специфики процессов образования странности рождение φ(1020)-мезонов измеряют вместе с рождением адронов с открытой странностью, например в паре с $K^*(892)^0$-резонансом. Масса φ(1020)-мезона (равна 1020 МэВ/c^2) близка к массе протона (938 МэВ/c^2). Сходство масс φ(1020)-мезона и протона позволяет использовать сравнительный анализ их спектров рождения для изучения природы барионной аномалии в процессах рождения частиц [4]. Резонанс φ(1020) обладает малым сечением взаимодействия с нестранной адронной средой, что позволяет ему сохранять информацию о ранних стадиях столкновения, не искажая ее в адронном газе [4]. Такая особенность делает φ(1020)-мезон чувствительным к эффектам возможного восстановления киральной симметрии. Данные по рождению φ(1020)-мезона служат эталоном при изучении характеристик адронной фазы и сопоставлении с выходами более короткоживущих резонансных состояний. По сравнению с $K^*(892)^0$-мезоном, время жизни φ(1020)-мезона в несколько раз превышает продолжительность адронной фазы и составляет 46,2 фм/c [7]. Благодаря данной особенности практически все рожденные φ(1020)-резонансы успевают покинуть файербол и распадаются далеко за пределами области взаимодействия сталкивающихся ядер. Дочерние частицы не рассеиваются в адронном газе, и рождение φ(1020)-резонансов практически не подвержено влиянию адронной фазы [4].

Измерение особенностей рождения резонансов, главным образом $K^*(892)^0$ и φ(1020), является неотъемлемой частью физической программы эксперимента MPD, который предусматривает работу как с неподвижной мишенью, так и со сталкивающимися пучками. В преддверии запуска ускорительного комплекса NICA и начала набора данных в эксперименте MPD ведется активная подготовка, направленная на поиск наиболее эффективных стратегий проведения измерений и оценке их применимости. Поскольку реальные экспериментальные данные на текущем этапе отсутствуют, ключевым инструментом подготовки выступает полномасштабное моделирование.

Настоящая работа направлена на создание процедуры реконструкции p_T-спектров (спектров рождения) $K^*(892)^0$-резонанса и φ(1020)-резонанса.

После разработки этой процедуры, с ее использованием открывается возможность оценки потенциала экспериментальной установки MPD измерять характеристики указанных частиц в столкновениях ядер ксенона и вольфрама (Xe + W) при кинетической энергии этих налетающих ядер 2,5 ГэВ на нуклон (E_{kin} = 2,5A ГэВ).

Эти исследования должны запускать, согласно плану, в эксперименте MPD вскоре после ввода комплекса NICA в эксплуатацию в режиме с фиксированной мишенью.

Основной акцент нашего исследования сделан на анализе свойств частиц в области центральных быстрот, в том числе на анализе их распределений по центральности ядерных столкновений и поперечному импульсу.

Экспериментальная установка MPD и методика модельного расчета

Особенности экспериментальной установки. Данный многоцелевой детектор с 4π-геометрическим аксептансом спроектирован для высокоточного восстановления характеристик лептонов, адронов и фотонов, образующихся в столкновениях релятивистских ядер при экстремальных температурах и плотностях, достижимых на ускорительном комплексе NICA [3]. Дать старт набору экспериментальных данных на установке планируется в течение года после официального запуска ускорительного комплекса NICA. Установка спроектирована с учетом необходимости регистрации частиц с малым поперечным импульсом p_T в условиях большой загрузки детекторных подсистем.

В столкновениях на ускорителе NICA модельные расчеты предсказывают ожидаемую плотность множественности заряженных частиц $dN_{ch}/d\eta$ (N_{ch} – число заряженных частиц, η – псевдобыстрота) равной 100 – 200 ед./событие в области малых быстрот.

Проект экспериментальной установки MPD предполагает создание системы с предельно высокими значениями временного, пространственного, импульсного и энергетического разрешения и широкого аксептанса, что критически важно для регистрации частиц с низкими значениями поперечного импульса; такие частицы образуются в основном в столкновениях ядер при энергиях ускорителя NICA [9].

Конструктивно спектрометр разделен на центральную часть и две передние детекторные подсистемы. Основой центральной системы выступает сверхпроводящий цилиндрический соленоидальный магнит, который обеспечивает внутри рабочего объема магнитное поле, обладающее пространственной однородностью и индукцией 0,5 Тл. Внутренний объем магнита вмещает комплекс регистрирующих систем, в который входят электромагнитный калориметр ECal, времяпролетная система TOF и времяпроекционная камера TPC. Аксептанс перечисленных центральных подсистем охватывает диапазон псевдобыстрот чуть менее 2 ед. Спереди и сзади к ним примыкают передние детекторные системы, состоящие из адронных калориметров (*англ.* Forward Hadron Calorimeter (FHCal)) и быстрых черенковских счетчиков (*англ.* Fast Forward Detector (FFD)). Эти системы покрывают область значений псевдобыстроты от 2 до 5 и выполняют важнейшие функции по классификации столкновений: отбор неупругих событий, реконструкцию плоскости реакции, определение центральности, а также измерение z-координаты вершины столкновения и времени столкновения для работы времяпролетной системы TOF. Информацию с детекторов будет считывать и обрабатывать быстрая система сбора данных с пропускной способностью до 6,5 ГБ/с, рассчитанная на частоту столкновений 7 кГц.

Времяпроекционная камера TPC – это основа трековой системы спектрометра. Камера измеряет траектории и импульсы заряженных частиц с проектным импульсным разрешением, составляющим 1,5 – 3,5 % для столкновений тяжелых ионов в диапазоне малых значений поперечного импульса p_T. Кроме того, детектор обеспечивает идентификацию заряженных адронов на основе измерения их удельных ионизационных потерь (dE/dx) в рабочем веществе детектора. Последний обеспечивает эффективное разделение пионов, каонов и протонов в интервале импульсов до 0,7 – 1,2 ГэВ/c.

Для значительного расширения диапазона идентификации заряженных частиц применяется детектор TOF. Устройство измеряет время пролета частиц с временным разрешением около 80 пс и расширяет область значений поперечных импульсов, в которой возможна дифференциация адронов до 1,5 – 2,5 ГэВ/с.

Актуальное описание экспериментальной установки MPD и входящих в нее детекторных подсистем приведено в статье [9].

Как было отмечено выше, возможности ускорительного комплекса NICA позволяют проводить эксперименты с неподвижной мишенью. В первой конфигурации эксперимента с неподвижной мишенью планируется облучать вольфрамовую неподвижную мишень W ядрами ксенона Xe при кинетической энергии налетающего пучка 2,5 ГэВ на нуклон (Xe + W, $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ). Эксперименты с неподвижной мишенью будут проведены одними из первых после достижения ускорителем NICA рабочих параметров. Мишень из вольфрамовой проволоки планируется закрепить на оси Z налетающего пучка перпендикулярно направлению движения пучка со смещением по оси Z на 85 см от геометрического центра спектрометра MPD. В настоящей работе рассматривался именно такая конфигурация сталкивающихся ядер.

Методика модельного расчета. Для всестороннего анализа процессов образования $K^*(892)^0$-резонанса и φ(1020)-резонанса в столкновениях Xe + W в режиме с неподвижной мишенью, при $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ, использовалась методика модельных расчетов и восстановления свойств резонансов, доработанная для новых условий и разработанная ранее для режима эксперимента MPD со встречными пучками частиц [4 – 6].

При кинетической энергии налетающих ядер $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ энергия столкновения ядер в системе центра масс составляет $\sqrt{S_{NN}} = 2{,}87$ ГэВ. Идентификация дочерних частиц распадов резонансов осуществлялась в соответствии с подходом, специально разработанным и учитывающим геометрию экспериментальной установки MPD с неподвижной мишенью. Работа по исследованию рождения заряженных адронов была проведена (см. статью [10]) в сталкивающейся системе, идентичной рассматриваемой в настоящей статье. Моделирование столкновений ядер Xe + W с учетом вышеописанных условий

было выполнено методом Монте-Карло с применением генератора событий UrQMD [11]. Как было показано в работе [10], в конфигурации эксперимента с фиксированной мишенью положение интервала центральных быстрот y смещается на величину $\Delta y = 0{,}986$ при переходе из системе центра масс (CMS) в лабораторную систему координат; это было учтено в модельных расчетах. В настоящем исследовании была использована выборка данных объемом 15 млн. (Xe + W)-столкновений.

Для исследуемых резонансов $K^*(892)^0$ и φ(1020) в настройках генератора событий UrQMD были выключены их распады. Другими словами, резонансы были заданы как стабильные частицы. Таким образом, эффекты поздней адронной фазы не влияли на их дочерние частицы, не препятствовали восстановлению их свойств в детекторных системах и не изменяли их спектры.

При разработке алгоритмов восстановления свойств резонансов, в настоящей работе особое внимание уделялось возможности восстановления их характеристик в максимально широком интервале значений поперечного импульса, в особенности в области малых значений, где рождается основная доля частиц. Ввиду сложности проводимых расчетов, не представилось возможным накопить выборку, включающую 50 млн. столкновений, как в исследовании рождения резонансов в режиме со встречными пучками частиц [4, 5], поэтому для исследований зависимости характеристик от центральности было выбрано лишь три интервала центральностей вместо семи. Центральность определялась на основе информации о множественности заряженных треков, реконструированных во времяпроекционной камере TPC.

На основе платформы модельных расчетов MpdRoot [2, 9] был реализован завершающий цикл обработки данных. Были смоделированы отклики детекторных систем на пролетающие через них частицы, а затем восстановлены и треки заряженных частиц. Платформа была основана на программных комплексах Geant4 и ROOT.

Инструментарий Geant4 предназначен для численного моделирования процессов прохождения элементарных частиц через вещество.

Платформа ROOT позволяет реализовать анализ и визуализацию данных, получаемых в эксперименте.

Платформа MpdRoot обеспечивает полную идентичность алгоритмов реконструкции частиц тем методам, которые будут использоваться при анализе реальных данных эксперимента.

Моделирование проводилось с опорой на реальное расположение и актуальные физические характеристики всех детектирующих систем эксперимента, что обеспечивало высокую достоверность результатов. Резонансы восстанавливались в каналах распада

$$K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^- \text{ и } \varphi(1020) \to K^+ + K^-$$

и моделировались непосредственно внутри среды MpdRoot в соответствии с их общепринятыми табличными параметрами, с помощью встроенного инструментария в программе Geant.

Треки заряженных частиц восстанавливались в детекторе TPC. Для сведения к минимуму неверно реконструированных и идентифицированных треков применялись следующие критерии отбора заряженных частиц:

$$N_{\text{TPC}} > 28,\ p_T > 0{,}05 \text{ ГэВ}/c,\ r_Z < 1 \text{ см},$$

где N_{TPC} – число точек, восстановленных в детекторе TPC; p_T – поперечный импульс частицы; r_Z – расстояние минимального сближения трека с вершиной столкновения (рассчитывается для каждого столкновения).

Данные критерии отбора также обеспечивают оптимальное отношение сигнала к фону за счет эффективного отсечения вторичных частиц при минимальных потерях первичных.

Идентификация заряженных частиц была выполнена на основе учета энергетических потерь заряженных частиц в детекторе TPC и результатов временных измерений в детекторе TOF; при этом использовался подход к σ-параметризации информации об их идентификации с учетом особенностей конфигурации детектора MPD с неподвижной мишенью [10]. Отбор пионов проводился согласно требованию, по которому измеренный сигнал ионизационных потерь в детекторе TPC должен укладываться в пределы двух

среднеквадратичных отклонений (2σ) от ожидаемого значения. Если же трек имел продолжение в детекторе TOF, то к времяпролетной информации также применялся критерий 2σ. Для идентификации каонов использовались более жесткие условия: сигнал в детекторах TPC или TOF должен был находиться в пределах 1σ, а также дополнительно применялся «вето-критерий» 3σ, согласно которому исключались частицы, чьи характеристики соответствовали протонам, пионам, электронам или мюонам. Ввиду выраженной асимметрии в сечениях рождения адронов (в частности, сильного подавления выхода K^-, по сравнению с K^+), наблюдаемой при рассматриваемой энергии столкновений, процедуры отбора и последующего анализа спектров проводились строго раздельно для положительно и отрицательно заряженных частиц.

Восстановление параметров $K^*(892)^0$-резонанса и φ(1020)-резонанса выполнялось методом инвариантной массы. Использовался подход, аналогичный исследованию рождения φ(1020)-резонанса в столкновениях ядер висмута при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 9,2 ГэВ [4]. Противоположно заряженные идентифицированные частицы (K^+ и π^- для $K^*(892)^0$-резонанса, а также K^+ и K^- для φ(1020)-резонанса), прошедшие все этапы отбора, комбинировались в кинематические пары в пределах одного столкновения. Для каждой пары вычислялись поперечный импульс p_T и инвариантная масса для пар положительно заряженного каона и отрицательно заряженного пиона ($M_{\pi K}$) и пар противоположно заряженных каонов (M_{KK}).

Аналогично исследованию рождения заряженных адронов в рассматриваемой конфигурации столкновений, опубликованному в статье [10], для резонансов также наблюдается значительная неоднородность в доступном фазовом пространстве (в координатах $p_T - y$). Наблюдаемый эффект объясняется смещением интервала центральных быстрот к краю рабочего объема детектора TPC. Для минимизации данного эффекта свойства резонансов восстанавливались в асимметричном интервале быстрот ($-1 < y_{\text{CMS}} < 0$) без использования дополнительных ограничений на минимальный поперечный импульс частиц.

Спектры восстановленной инвариантной массы $M_{\pi K}$ и M_{KK} представлены на рис. 1. В качестве примера был выбран интервал $0{,}4 < p_T^p < 0{,}6$ ГэВ/c (p_T^p – интервал по поперечному импульсу пары). Показан как первоначальный спектр, так и спектр после вычитания комбинаторного фона. Представленные распределения содержат вклад от фоновых событий, а также сигнальный пик от изучаемого канала распада. Фоновые события в спектре возникают в основном из-за комбинаторной составляющей, которая обусловлена формированием пар из всех возможных заряженных частиц столкновения, прошедших критерии отбора, перечисленные выше. Оценка вклада фоновых событий в спектр проводилась методом смешивания событий (Mixed Events) с последующим вычитанием нормированной оценки из первоначального спектра. Фоновые события вычислялись как инвариантные массы пар дочерних частиц, составленных из заряженных частиц 10 столкновений с близкими параметрами. Похожими считались столкновения с близкими значениями множественности вторичных частиц и координатами вершины взаимодействия. Распределение фоновых событий было умножено на коэффициент, приводящий фоновое распределение к первоначальному спектру $M_{\pi K}$ или M_{KK} в области больших масс, где вклад физических корреляций пренебрежимо мал.

Результаты вычитания фоновых событий из инвариантных спектров представлены на рис. 1, *b* и *d*. Применяемый подход позволяет существенно «очистить» спектры $M_{\pi K}$ и M_{KK} от фоновых событий. В основном в спектре остаются отчетливо наблюдаемые пики, соответствующие распадам

$$K^*(892)^0 \rightarrow K^+ + \pi^- \text{ и } \varphi(1020) \rightarrow K^+ + K^-.$$

Процедура извлечения выходов резонансов $K^*(892)^0$ и φ(1020) базировалась на аппроксимации остаточных спектров комбинацией теоретического профиля Брейта – Вигнера для учета распада исследуемого резонанса, размытого функцией Гаусса для учета приборного разрешения, и многочлена второго порядка для учета остаточных фоновых событий. Остаточные фоновые события обусловлены струями и ложными комбинациями пионов и каонов, рожденных от более тяжелых адронов.

Для оценки массового разрешения были построены распределения

$$M^r_{\pi K} - M^t_{\pi K} \text{ и } M^r_{KK} - M^t_{KK},$$

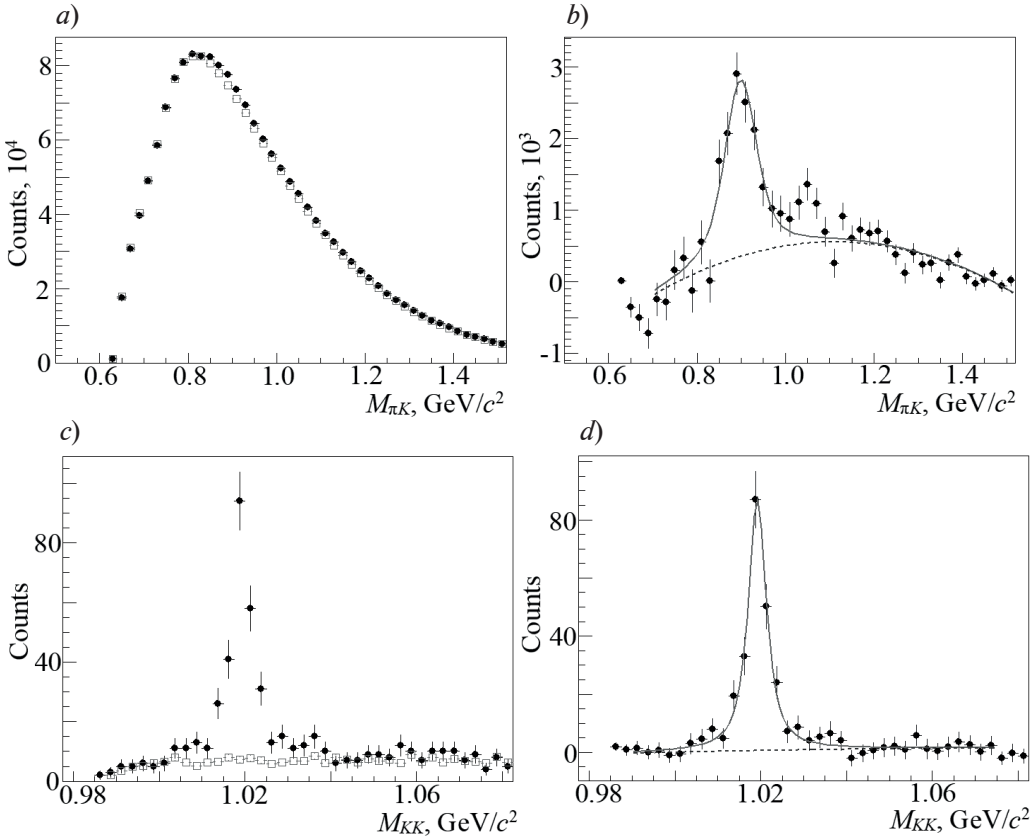


Рис. 1. Спектры инвариантной массы $M_{\pi K}$ (*a*, *b*) и M_{KK} (*c*, *d*) до (*a*, *c*) и после (*b*, *d*) вычитания вклада от фоновых событий (незатушеванные квадраты) для столкновений Xe + W при $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ и $0{,}4 < p_T^p < 0{,}6$ ГэВ/*c*. Пик аппроксимирован теоретическим профилем Брейта – Вигнера, размытого функцией Гаусса (сплошная линия), а остаточный фон – многочленом второго порядка (пунктир)

где $M^r_{\pi K}$ – восстановленное значение массы в канале распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$; $M^t_{\pi K}$ – истинное значение массы $K^*(892)^0$-резонанса; M^r_{KK} – восстановленное значение массы в канале распада $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$; M^t_{KK} – истинное значение массы $\varphi(1020)$-резонанса.

Полученные разрешения были аппроксимированы функцией Гаусса. Значения ширины полученных распределений $\sigma_{MK\pi}$ для канала распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ и σ_{MKK} для канала $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ брались в качестве массового разрешения экспериментальной установки. Массовое разрешение оценивалось для всех возможных диапазонов по поперечному импульсу. Полученные зависимости $\sigma_{MK\pi}$ и σ_{MKK} от поперечного импульса пары p_T представлены на рис. 2. Для распадов $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ и $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$, разрешения $\sigma_{MK\pi}$ и σ_{MKK} составили 5 – 6 МэВ и 1 – 2 МэВ, соответственно. Оценка массовых разрешений свидетельствует не только о возможности с хорошей точностью измерять форму пиков резонансов, но и отслеживать возможные изменения формы.

Интеграл свертки профиля Брейта – Вигнера с функцией Гаусса при заданном значении массового разрешения оценочной величиной брался в качестве выходов $K^*(892)^0$- и $\varphi(1020)$-резонансов.

Следует подчеркнуть, что использованная процедура представляет собой общепринятый подход к определению характеристик резонансов на основе анализа распределений инвариантных масс пар дочерних частиц, применяемой в эксперименте ALICE на ускорителе LHC [12].

Значения выходов в столкновениях Xe + W были получены как функции от p_T и центральности ядерного взаимодействия.

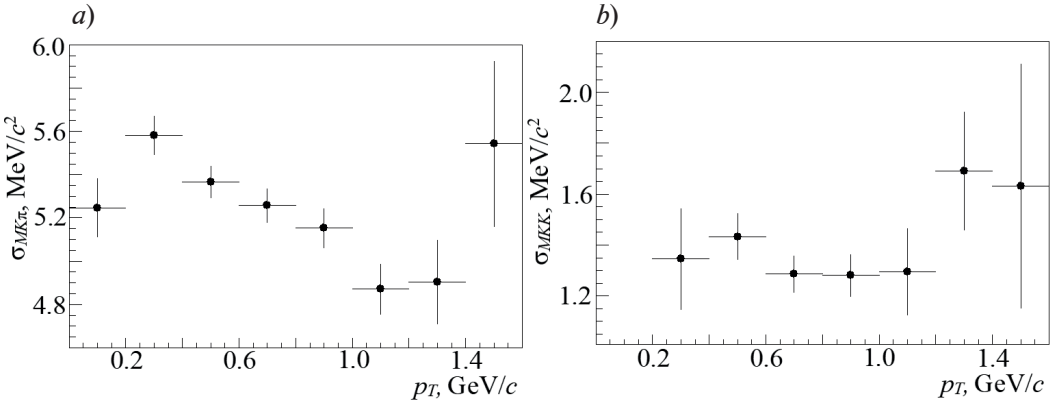


Рис. 2. Зависимости разрешений $\sigma_{MK\pi}$ и σ_{MKK} от p_T для каналов распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ (*a*) и $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ (*b*) для столкновений Xe + W при энергии $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ

Эффективность регистрации ε, а именно вероятность регистрации резонансов $K^*(892)^0$ или φ(1020) в канале распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ или $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ вычислялась по формулам

$$N^r_{\pi K} / N^t_{\pi K} \text{ либо } N^r_{KK} / N^t_{KK},$$

где $N^r_{\pi K}$ – восстановленное число $K^*(892)^0$-резонансов в канале распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$; $N^t_{\pi K}$ – изначально сгенерированное число $K^*(892)^0$-резонансов; N^r_{KK} – восстановленное число φ(1020)-резонансов в канале распада $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$; N^t_{KK} – изначально сгенерированное число φ(1020) -резонансов.

При вычислении соответствующей эффективности регистрации отношение умножалось на вероятность распада в соответствующем канале. На рис. 3 продемонстрированы зависимости эффективности ε от поперечного импульса p_T резонансов $K^*(892)^0$ или φ(1020).

Для $K^*(892)^0$- и φ(1020)-резонансов наблюдается рост эффективностей регистрации с увеличением поперечного импульса. В интервале значений поперечных импульсов свыше 1 ГэВ/*c* эффективность достигает 30% для $K^*(892)^0$-резонанса и 20% для φ(1020)-резонанса.

Полученные оценки эффективностей показывают, что применение разработанной нами методики позволяет восстанавливать свойства $K^*(892)^0$-резонансов с поперечным импульсом, превышающим нуль, и φ(1020)-резонансов с поперечным импульсом 0,2 ГэВ/*c*. Ограничения по восстановлению характеристик резонансов с большими поперечными импульсами отсутствуют, и возможность регистрации таких резонансов регулируется накопленной выборкой экспериментальных данных.

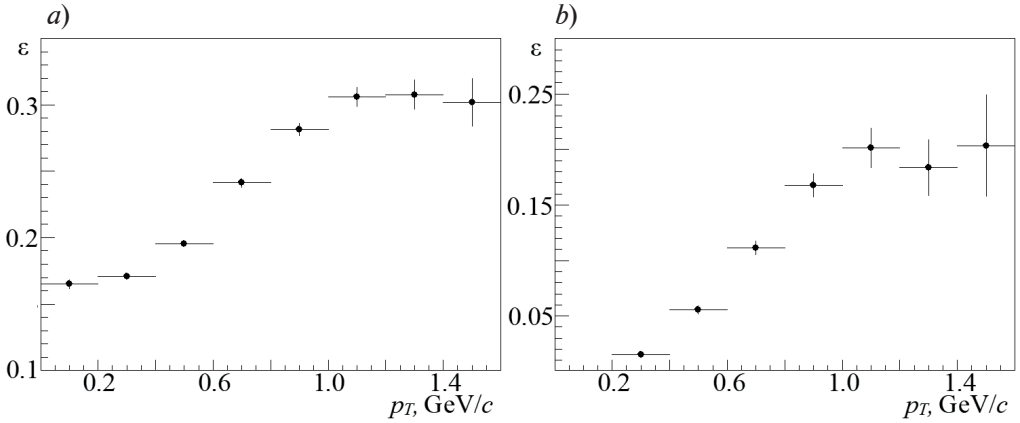


Рис. 3. Зависимости от поперечного импульса эффективности регистрации ε резонансов $K^*(892)^0$ в канале распада $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ (*a*) и φ(1020)-резонансов в канале $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ (*b*) для столкновений Xe + W при энергии $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ

Результаты расчетов

Для формирования спектров по поперечному импульсу рассчитывались дифференциальные выходы в выбранных интервалах по центральности (Xe + W)-столкновений и интервалов по поперечному импульсу согласно следующему выражению [10]:

$$\frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{N(p_T)}{N_{ev}\varepsilon(p_T)\Delta p_T \Delta y},$$

где N_{ev} – количество обработанных событий Xe + W; $\varepsilon(p_T)$ – эффективность регистрации $K^*(892)^0$- или φ(1020)-резонансов; p_T, Δp_T, ГэВ/c, – их поперечный импульс и рассматриваемый диапазон его значений; y, Δy – их быстрота и рассматриваемый диапазон ее значений; $N(p_T)$ – выходы $K^*(892)^0$- или φ(1020)-резонансов.

Результаты расчетов спектров по поперечному импульсу продемонстрированы на рис. 4. Спектры рассчитаны для распадов $K^*(892)^0$- и φ(1020)-резонансов в каналах $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ и $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$ в столкновениях Xe + W при энергии $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ. Расчеты выполнены для области быстрот $-1{,}0 < y_{\mathrm{CMS}} < 0{,}0$ для трех диапазонов центральностей столкновений. На рис. 4 представлено два вида спектров: восстановленные с помощью специально разработанной методики, описанной выше, и исходные спектры, смоделированные генератором событий. Наблюдаемое подобие спектров подтверждает корректность методики анализа, предложенной в работе.

Полученные спектры дали возможность оценить минимальный объем экспериментальных данных, требуемый для регистрации распадов $K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^-$ и $\varphi(1020) \to K^+ + K^-$. Таким образом, для детального анализа спектральных характеристик $K^*(892)^0$- и φ(1020)-резонансов, определения их выходов в различных диапазонах центральности и поперечного импульса необходима выборка, превышающая 15 млн. столкновений Xe + W.

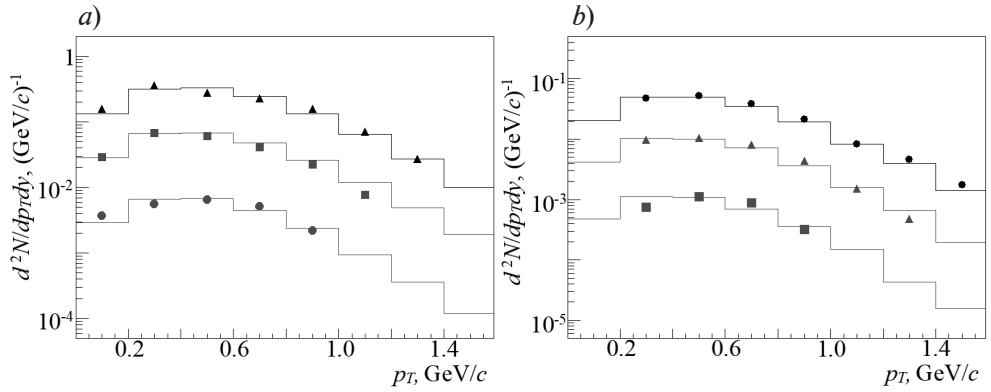


Рис. 4. Исходные (линии) и восстановленные (символы) спектры рождения $K^*(892)^0$- (*a*) и φ(1020)- (*b*) резонансов для столкновений Xe + W при энергии $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ в области быстрот $-1{,}0 < y_{\mathrm{CMS}} < 0{,}0$.
Рассмотрены 3 диапазона по центральности, %: 0 – 20 (▲), 20 – 40 (■) и 40 – 90 (•).
Для удобства сравнения спектры представлены на совмещенном графике с использованием масштабных коэффициентов

Заключение

В настоящей статье представлены оценки чувствительности детекторных систем эксперимента MPD к измерению характеристик странных резонансов $K^*(892)^0$ и φ(1020) в условиях неподвижной вольфрамовой мишени и пучка ядер ксенона с энергией 2,5 ГэВ на нуклон. Работа базируется на моделировании (Xe + W)-столкновений при энергии $E_{kin} = 2{,}5A$ ГэВ и реконструкции адронных распадов резонансов

$$K^*(892)^0 \to K^+ + \pi^- \text{ и } \varphi(1020) \to K^+ + K^-.$$

Это позволило рассчитать p_T-зависимости основных параметров, в том числе разрешение по массе, эффективность восстановления и спектры по поперечному импульсу изучаемых резонансов.

Показано, что выборки экспериментальных данных в 15 млн. столкновений Xe + W будет достаточно для восстановления характеристик рассматриваемых резонансов с приемлемой точностью. Указанный объем данных обеспечивает исследование в диапазоне поперечных импульсов 0,0 − 1,6 ГэВ/c для $K^*(892)^0$-резонансов и 0,2 − 1,6 ГэВ/c для φ(1020)-резонансов. При этом характеристики можно восстанавливать в области быстрот $-1{,}0 < y_{CMS} < 0{,}0$ и трех диапазонах по центральности с шагом 20% для центральных/полуцентральных и с шагом 50% для периферийных столкновений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al. (**ALICE Collaboration). The ALICE experiment: A journey through QCD // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. No. 8. P. 813.

2. **Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al.** Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA // The European Physical Journal A. 2022. Vol. 58. No. 7. P. 140.

3. **Taranenko A.** Results from the RHIC beam energy scan // EPJ Web of Conferences. 2017. Vol. 164. 05 December. P. 06005.

4. **Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов А. Ю.** Возможности измерять свойства φ(1020)-мезона в столкновениях ядер висмута при энергии 9,2 ГэВ в ускорителе NICA на экспериментальной установке MPD // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 1. С. 129−141.

5. **Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов А. Ю.** Возможности измерять свойства заряженных $K^*(892)$-мезонов и Σ(1385)-барионов в столкновениях ядер висмута при энергии 9,2 ГэВ в ускорителе NICA на экспериментальной установке MPD // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 119−131.

6. **Ivanishchev D., Kotov D., Malaev M., Riabov V., Riabov Y.** Resonance reconstruction in the MPD // Particles. 2021. Vol. 4. No. 1. Pp. 29−36.

7. **Workman R. L., Burkert V. D., Crede V., et al.** (Particle Data Group and Others). Review of particle physics // Progress of Theoretical and Experimental Physics. 2022. Vol. 2022. No. 8. P. 083C01.

8. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration). Evidence of rescattering effect in Pb−Pb collisions at the LHC through production of $K^*(892)^0$ and ϕ(1020) mesons // Physics Letters B. 2020. Vol. 802 (10 March) P. 135225.

9. **Abdulin R., Abgaryan V., Abgaryan V., et. al.** (MPD Collaboration). MPD physics performance studies in Bi + Bi collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 9.2$ GeV // Revista Mexicana de Física (Mexican Society of Physics). 2025. Vol. 71. No. 4. P. 041201.

10. **Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В.** Возможности измерять свойства идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5A ГэВ в детекторе MPD на ускорителе NICA // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 177−189.

11. **Bleicher M., Zabrodin E., Spieles C., et al.** Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model // Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics. 1999. Vol. 25. No. 9. Pp. 1859−1896.

12. **Adam J., Adamová D., Aggarwal M. M., et al.** (ALICE Collaboration). $K^*(892)^0$ and φ(1020) meson production at high transverse momentum in pp and Pb-Pb collisions at $\sqrt{S_{NN}} = 2.76$ TeV // Physical Review C. 2017. Vol. 95. No. 6. P. 064606.

13. **Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Рябов В. Г., Рябов Ю. Г.** Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 3 (129). С. 134−139.

REFERENCES

1. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration), The ALICE experiment: A journey through QCD, Eur. Phys. J. C. 84 (8) (2024) 813.

2. **Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al.,** Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA, Eur. Phys. J. A. 58 (7) (2022) 140.

3. **Taranenko A.,** Results from the RHIC beam energy scan, EPJ Web Conf. 164 (05 Dec) (2017) 06005.

4. **Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al.,** Feasibility to measure the properties of φ(1020) meson in collisions of bismuth nuclei at an energy of 9.2 GeV in the NICA collider using the MPD experimental setup, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (1) (2025) 129–141 (in Russian).

5. **Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al.,** Feasibility to measure the properties of charged $K^*(892)$ mesons and Σ(1385) baryons in collisions of bismuth nuclei at an energy of 9.2 GeV in the NICA collider using the MPD experimental setup, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (2) (2025) 119–131 (in Russian).

6. **Ivanishchev D., Kotov D., Malaev M., et al.,** Resonance reconstruction in the MPD, Particles. 4 (1) (2021) 29–36.

7. **Workman R. L., Burkert V. D., Crede V., et al.** (Particle Data Group and Others), Review of particle physics, Prog. Theor. Exp. Phys. (8) (2022) 083C01.

8. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration), Evidence of rescattering effect in Pb–Pb collisions at the LHC through production of $K^*(892)0$ and φ(1020) mesons, Phys. Lett. B. 802 (10 March) (2020) 135225.

9. **Abdulin R., Abgaryan V., Abgaryan V., et. al.** (MPD Collaboration), MPD physics performance studies in Bi + Bi collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 9.2 GeV, Rev. Mex. Fнs. (Mex. Soc. Phys.). 71 (4) (2025) 041201.

10. **Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al.,** Feasibility to measure the properties of identified charged hadrons in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV in the MPD detector at the NICA collider, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 177–189 (in Russian).

11. **Bleicher M., Zabrodin E., Spieles C., et al.,** Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model, J. Phys. G. Nucl. Part. Phys. 25 (9) (1999) 1859–1896.

12. **Adam J., Adamová D., Aggarwal M. M., et al.** (ALICE Collaboration), $K^*(892)^0$ and φ(1020) meson production at high transverse momentum in pp and Pb-Pb collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 2.76 TeV, Phys. Rev. C. 95 (6) (2017) 064606.

13. **Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al.,** K_s-mesons production in d + Au collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (129)) (2011) 134–139 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

yberdnikov1947@gmail.com

ORCID: 0000-0003-0309-5917

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург; ученый секретарь отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru
ORCID: 0000-0003-3298-3702

КОТОВ Дмитрий Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

МАЛАЕВ Михаил Владимирович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Mmalayev@gmail.com
ORCID: 0009-0001-9974-0169

РЯБОВ Юрий Германович – *кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики имени Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области, Россия.*
188300, Россия Ленинградская область, г. Гатчина микрорайон Орлова роща, 1
ryabov_yg@pnpi.nrcki.ru
ORCID: 0000-0002-3028-8776

THE AUTHORS

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
yberdnikov1947@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0309-5917

IVANISHCHEV Dmitry A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University;
Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute»
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru
ORCID: 0000-0003-3298-3702

KOTOV Dmitry O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

MALAEV Mikhail V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Mmalayev@gmail.com
ORCID: 0009-0001-9974-0169

RIABOV Yuriy G.
Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute»
1, Orlova Roshcha (Mcr), Gatchina, Leningrad Region, 188300, Russia
ryabov_yg@pnpi.nrcki.ru
ORCID: 0000-0002-3028-8776

Статья поступила в редакцию 13.03.2026. Одобрена после рецензирования 14.04.2026. Принята 14.04.2026.
Received 13.03.2026. Approved after reviewing 14.04.2026. Accepted 14.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 539.125.4, 539.126.3
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19311

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦЕНТРАЛЬНОСТИ ИОН-ИОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В УСЛОВИЯХ МАЛЫХ ЗНАЧЕНИЙ МНОЖЕСТВЕННОСТИ

Д. М. Ларионова ✉, Я. А. Бердников, Д. О. Котов, Д. А. Трушков
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ dashalario@gmail.com

Аннотация. Центральность ион-ионных столкновений – важный параметр, который определяет начальную геометрию взаимодействия и существенно влияет на интерпретацию экспериментальных результатов. Поскольку центральность невозможно измерять прямыми экспериментами, на практике используются различные модельно-зависимые методы. Определение центральности в международном масштабном физическом эксперименте SPD (Spin physics detector) на базе сверхпроводящего ускорительного комплекса NICA сталкивается с серьезными трудностями вследствие низких значений множественности частиц в малых системах столкновений при низких энергиях, например ядер алюминия при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ. В настоящей работе исследована применимость традиционных методов определения центральности, основанных на измерении параметров множественности заряженных частиц и энергии нуклонов-спектаторов в условиях эксперимента SPD. Кроме того, рассмотрена возможность повышения точности определения центральности путем использования набора экспериментально наблюдаемых величин и методов машинного обучения на основе дерева решений.

Ключевые слова: центральность, ион-ионные столкновения, эксперимент SPD, коллайдер, малая множественность, машинное обучение

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Трушков Д. А. Определение центральности ион-ионных столкновений в условиях малых значений множественности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 139–149. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.19311

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19311

DETERMINATION OF THE CENTRALITY OF ION-ION COLLISIONS UNDER LOW MULTIPLICITY CONDITIONS

D. M. Larionova ✉, Ya. A. Berdnikov, D. O. Kotov, D. A. Trushkov
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ dashalario@gmail.com

Abstract. The centrality of ion-ion collisions is an important parameter that defines the initial geometry of the interaction and significantly influences the interpretation of experimental results. Since centrality cannot be measured by direct experiments, various model-dependent methods are used in practice. In SPD (Spin physics detector) experiment located at NICA collider centrality determination is particularly challenging due to low particle multiplicities in small collision systems at low energies, such as Al+Al collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 GeV. In this

© Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Трушков Д. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

work, the applicability of traditional centrality determination methods based on charged-particle multiplicities and spectator nucleon energy deposition is investigated under SPD conditions. In addition, the potential for improving centrality determination by using a set of experimental observables and machine-learning techniques based on decision tree classifiers is explored.

Keywords: centrality, ion-ion collisions, SPD experiment, collider, low multiplicity, machine learning

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Trushkov D. A., Determination of the centrality of ion-ion collisions under low multiplicity conditions, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 139–149. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19311

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

Введение

Столкновения релятивистских ионов – это основной инструмент экспериментального исследования ядерной материи. Одной из ключевых характеристик ион-ионных столкновений является центральность, поскольку она задает начальную геометрию системы и существенно влияет на интерпретацию экспериментальных результатов [1].

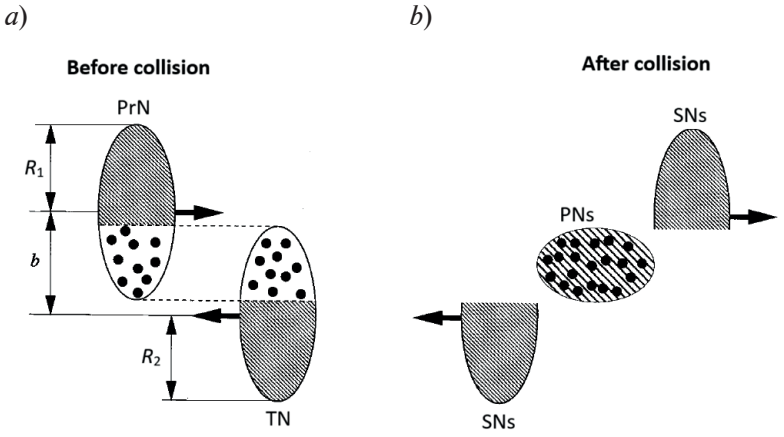


Рис. 1. Схематическое изображение геометрии столкновения релятивистских ионов до (*a*) и после (*b*) этого события:
PrN (Projectile Nucleous) – ядро-снаряд, TN (Target Nucleous) – ядро-мишень;
SNs (Spectators Nucleons) – нуклоны-спектаторы, PNs (Participating Nucleons) – нуклоны-участники;
b – прицельный параметр, R_1, R_2 – радиусы сталкивающихся ядер

Начальная геометрия системы сталкивающихся ионов (рис. 1) определяется прицельным параметром b, количеством нуклонов-участников (нуклоны, испытавшие хотя бы одно неупругое взаимодействие), количеством нуклонов-спектаторов (нуклоны, которые не претерпели ни одного неупругого взаимодействия), а также центральностью, которая характеризует степень перекрытия сталкивающихся ядер.

По определению, центральность с ядро-ядерного столкновения A+A соответствует доле полного неупругого сечения, обусловленной столкновениями с прицельными параметрами b', значения которых ниже значения b, по сравнению с полным неупругим сечением σ_{AA} (A+A)-столкновения [1 – 3]:

© Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Trushkov D. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

$$c(b) = \frac{1}{\sigma_{AA}} \int_0^b \frac{d\sigma}{db'} db'. \quad (1)$$

Величину центральности $c(b)$ принято выражать в процентах: наиболее центральным столкновениям, реализующимся при значениях параметра удара $b = 0$, соответствует центральность $c = 0\%$, тогда как наиболее периферические столкновения характеризуются значением $c = 100\%$.

Основная трудность определения центральности заключается в невозможности непосредственного измерения в эксперименте параметра удара. В связи с этим процедура определения центральности основана на сопоставлении параметров начальной геометрии столкновения с величинами, измеряемыми экспериментально. Наибольшее распространение получили подходы, использующие множественность рожденных частиц и суммарное энерговыделение спектаторных нуклонов в процессе соударения. Подобная стратегия успешно применяется (см., например, работы [1 – 7]) в таких экспериментах, как PHENIX [8] и STAR [9] на установке «Релятивистский коллайдер тяжелых ионов» (*англ.* Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC)) при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ, а также в эксперименте ALICE [10] на Большом адронном коллайдере (*англ.* Large Hadron Collider (LHC)) при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 5{,}0 - 13{,}6$ ТэВ.

В то же время применимость этих методик в условиях низких значений множественности заряженных частиц, характерных для эксперимента SPD [11] на сверхпроводящем ускорительном комплексе (коллайдер, *англ.* Nuclotron-based Ion Collider fAcility (NICA)) при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 5 - 13$ ГэВ, требует отдельного анализа и обоснования.

В связи с вышеизложенным настоящая работа посвящена исследованию точности определения центральности с использованием традиционных подходов, а также поиску и обоснованию оптимального метода определения центральности для эксперимента SPD (Spin Physics Detector).

Напомним, что SPD – это масштабный международный физический эксперимент, который строится на коллайдере NICA в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) в Дубне. Дубна – это российский город-наукоград на севере Московской области, расположенный в 120 – 130 км от Москвы, на берегу реки Волги и на границе с Тверской областью.

Методики экспериментального определения центральности

Поскольку центральность столкновения невозможно измерить непосредственно при экспериментальных исследованиях из-за того, что нельзя прямо определить прицельный параметр этого столкновения, исследователи вынуждены прибегать к самым разным модельно-зависимым подходам. В основе этих методов лежит идея замены прицельного параметра b и дифференциального сечения $d\sigma/db$ экспериментально измеряемой величиной, которая статистически связана с геометрией столкновения [2, 3]. Наиболее удобными для этой цели являются наблюдаемые, линейно-пропорциональные величинам $d\sigma/db$ и b.

В настоящее время наибольшее распространение получили два подхода к определению центральности, основанные на различных экспериментально наблюдаемых. Первый использует множественность заряженных частиц, рождающихся в процессе соударения ионов, а второй опирается на измерение энергии, уносимой спектаторными нуклонами.

Метод определения центральности по множественности заряженных частиц

Указанный метод является одним из наиболее распространенных [2 – 4] и широко используется в таких экспериментах, как PHENIX, STAR и ALICE. Методы определения центральности по данным о множественности основаны на монотонной корреляции между прицельным параметром и множественностью заряженных частиц, следующей из оптической модели и модели Глаубера [1]. В рамках этих моделей дифференциальное сечение $d\sigma/db$ и величина множественности заряженных частиц M_{ch} пропорциональны прицельному параметру при значениях параметра b, меньших суммы радиусов сталкивающихся ядер.

На рис. 2, *a* показана зависимость полного геометрического сечения, рассчитанного в рамках модели Глаубера для столкновений дейтерия с ядром золота (*d* + Au), а также ядер меди и золота (Cu + Cu и Au + Au) при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ [1]. Желтая линия демонстрирует расчетный результат, полученный в оптическом пределе для системы Au + Au. Видно, что прямая пропорциональность между величинами дифференциального сечения и параметра *b* ($d\sigma/db \sim b$) наблюдается для значений прицельного параметра, меньших суммы радиусов сталкивающихся ионов $R = R_A + R_B$, равных примерно 8 фм для (*d* + Au)-, 10 фм для (Cu + Cu)- и 14 фм для (Au + Au)-столкновений. При бóльших значениях прицельного параметра, соответствующих так называемым ультрапериферическим столкновениям (столкновения, которые характеризуются значением $b > R$), эта пропорциональность нарушается. На рис. 2, *b* приведена взаимозависимость между параметрами множественности и центральности, а также прицельным параметром и в (Au+Au)-столкновениях при энергии коллайдера NICA. Расчетные результаты, представленная на рис. 2, получены с применением специальной программы UrQMD (Ultra-relativistic Quantum Molecular Dynamics).

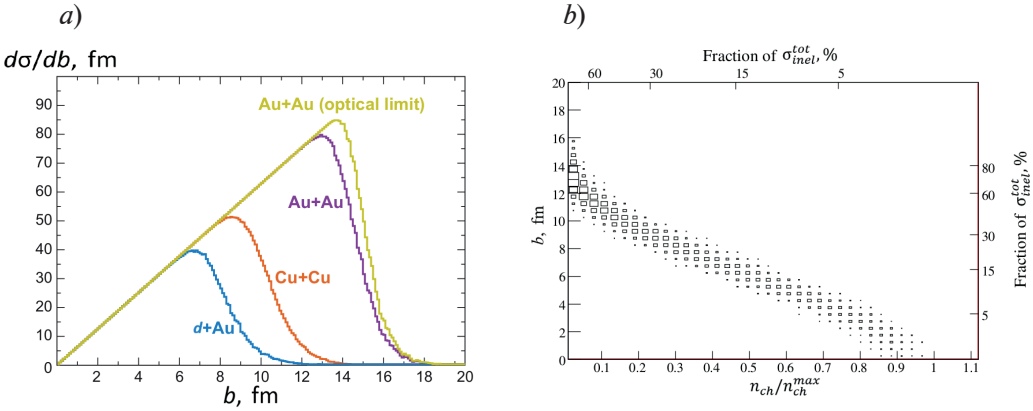


Рис. 2. Корреляции между ключевыми параметрами столкновений:
a – расчетное полное геометрическое сечение, полученное в рамках модели Глаубера методом Монте-Карло для столкновений *d* + Au, Cu + Cu и Au + Au при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ; желтая линия отражает расчетный результат в оптическом пределе для системы Au + Au; *b* – взаимозависимость между множественностью, прицельным параметром и центральностью в (Au+Au)-столкновениях

В эксперименте SPD задача определения центральности существенно усложняется тем, что исследуются сравнительно малые системы при низких энергиях, где наблюдаются значительно меньшие значения множественности заряженных частиц. Так, в столкновениях Al + Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ множественность не превышает примерно 120 частиц, тогда как в эксперименте PHENIX для (Au + Au)-столкновений при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ она достигает значений порядка 800.

В данной работе аналогичные зависимости между дифференциальным сечением, прицельным параметром и множественностью были рассчитаны для системы Al + Al при энергии $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ, соответствующей программе SPD (рис. 3, *a*). Анализ распределений показывает, что при фиксированном значении прицельного параметра распределение множественности заряженных частиц можно описать функцией Гаусса с заданным стандартным отклонением σ. Величина σ является одним из основных источников неопределенности при определении центральности, поскольку при одном и том же значении прицельного параметра значение множественности колеблется в пределах σ. В результате замену выражения $(d\sigma/db')\cdot db'$ экспериментально измеряемой величиной множественности в интеграле, определяющем центральность, можно выполнить лишь с точностью, ограниченной величиной σ.

Дополнительно была получена зависимость дифференциального сечения от прицельного параметра для (Al + Al)-столкновений. Следует отметить, что при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ доля ультрапериферических столкновений существенно выше, чем в случае Au + Au при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ (рис. 3, *b*). В ультрапериферических событиях, как правило, доминируют

кулоновские взаимодействия, обусловленные взаимодействием ядер в области «хвостов» распределения Вудса – Саксона, описывающих плотность распределения заряда в ядре. В связи с этим для условий эксперимента SPD представляется целесообразным выделять ультрапериферические столкновения в отдельный класс центральности.

В дальнейшем анализе рассматриваются только события с значениями прицельного параметра $b \leq R$.

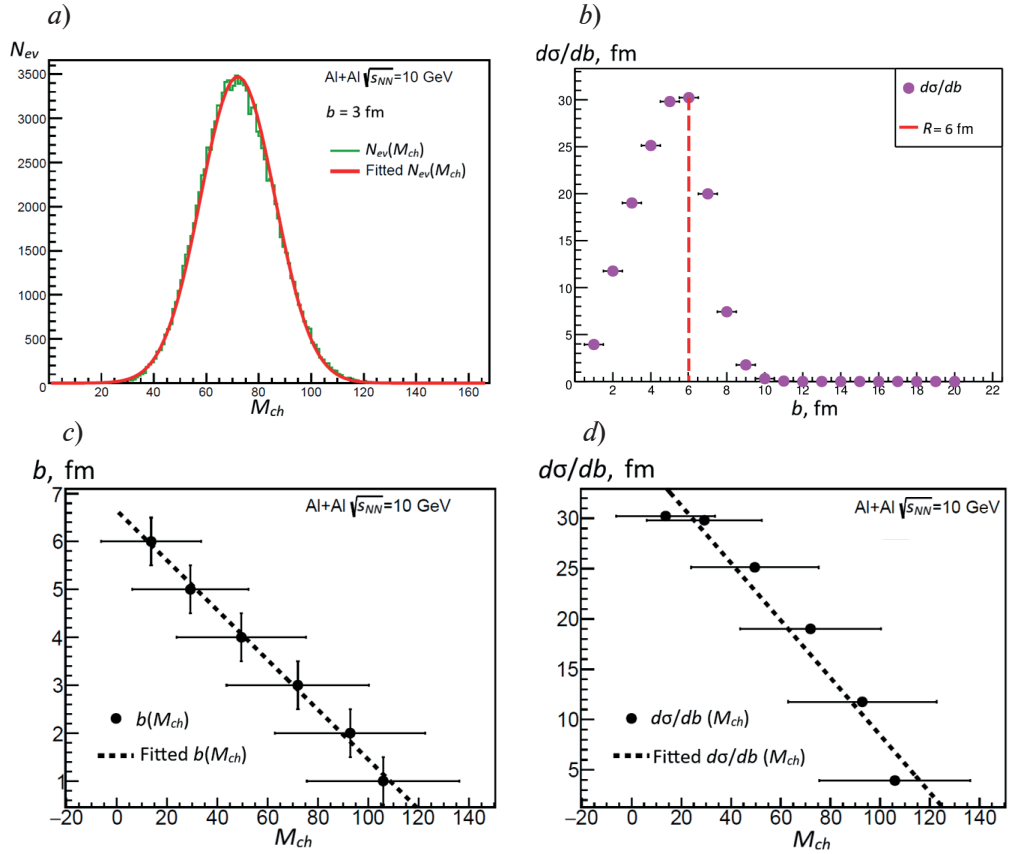


Рис. 3. Расчетные результаты по взаимосвязи параметров множественности заряженных частиц M_{ch} и прицельного параметра b для столкновений Al + Al при $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ:
a – гистограмма множественности заряженных частиц при фиксированном значении прицельного параметра $b = 3$ фм; *b* – полное геометрическое сечение; *c*, *d* – зависимости от множественности частиц M_{ch} прицельного параметра b (*c*) и дифференциального сечения $d\sigma/db$ (*d*); пунктирными линиями обозначена линейная аппроксимация представленных зависимостей (*c*, *d*)

На рис. 3, *c* и *d* приведены зависимости прицельного параметра b и дифференциального сечения $d\sigma/db$ от множественности заряженных частиц M_{ch} для столкновений Al + Al при $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ. Анализ этих результатов показывает, что в первом приближении эти данные можно аппроксимировать линейными функциями и, следовательно, их использовать для определения центральности в эксперименте SPD. Однако систематические погрешности, обусловленные шириной распределений (они обозначены отрезками на графиках), оказываются достаточно большими (±30, т.е. превышают 30%) и вносят существенный вклад в общую неопределенность определения центральности.

На практике метод определения центральности по множественности заключается в построении гистограммы суммарного заряда или числа заряженных частиц, зарегистрированных в событии. Далее эта гистограмма разбивается на интервалы таким образом, чтобы каждый класс центральности содержал одинаковое число событий. Пример таких гистограмм и соответствующих разбиений показан на рис. 4 для (Au + Au)-столкновений при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и (Al + Al)-столкновений при $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ. Вертикальные линии обозначают границы классов центральности, а кривые Гаусса соответствуют

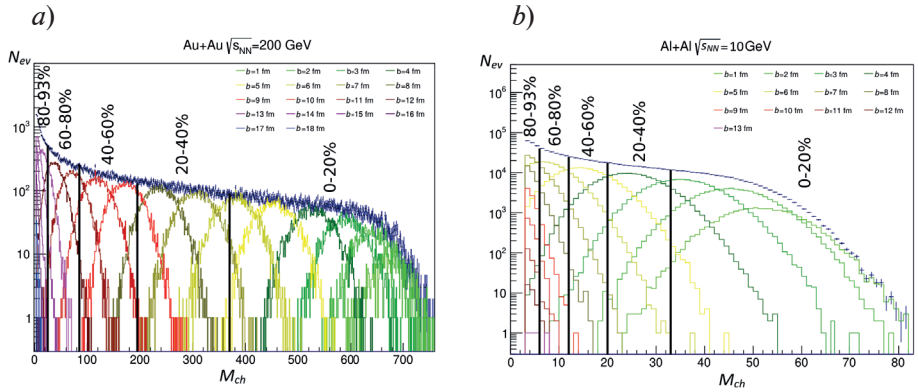


Рис. 4. Сравнение гистограмм распределения множественности заряженных частиц, измеренных в столкновениях Au+Au при $\sqrt{s_{NN}}$ = 200 ГэВ (*a*) и Al+Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ (*b*). Границы классов центральности (%) указаны вертикальными линиями; распределения множественности, полученные при фиксированных значениях прицельного параметра *b* (см. легенды), показаны цветными кривыми

распределениям суммарного заряда при фиксированных значениях прицельного параметра *b*. Видно, что для столкновений Au + Au значения ширины гауссовых распределений существенно ниже, чем для Al + Al, что указывает на значительно меньшие флуктуации множественности. В случае Al + Al большие значения σ приводят к тому, что события с одинаковым прицельным параметром могут быть отнесены к различным классам центральности несмотря на то, что, согласно определению центральности, прицельный параметр и центральность связаны взаимно однозначно.

Таким образом, если исходить из величины стандартного отклонения σ, то точность определения центральности в столкновениях Al + Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ методом измерения множественности заряженных частиц можно оценить на уровне около 30%.

Метод определения центральности, основанный на измерении энерговыделения нуклонов-спектаторов

Помимо вышеописанного, широко используется альтернативный метод определения центральности, основанный на измерении энергии, уносимой нуклонами-спектаторами [2, 3, 5]. Анализ двумерного распределения энергии этих нуклонов по значениям прицельного параметра показывает (рис. 5, *a*), что для центральных столкновений относительная погрешность определения центральности данным методом составляет около 9%, что существенно меньше, по сравнению с методом, основанным на использовании множественности заряженных частиц.

Существенным отличием данного подхода от метода множественности является обратная корреляция между измеряемой величиной и центральностью столкновения (рис. 5, *b*). Периферические события характеризуются большим числом спектаторов, которые уносят значительную часть энергии, при этом множественность заряженных частиц остается сравнительно малой. Напротив, в центральных столкновениях число нуклонов-спектаторов существенно уменьшается, что приводит к меньшему энерговыделению в соответствующих детекторах и одновременно к высокой множественности рожденных частиц. Определение классов центральности на основе энергии спектаторов позволяет более точно восстанавливать геометрию столкновения и тем самым эффективно дополняет информацию, получаемую при анализе множественности заряженных частиц.

Важно отметить, что совместное использование обоих методов представляется перспективным способом снижения систематических неопределенностей. Пример такого комбинированного подхода был успешно реализован в одном из крупных экспериментов, что демонстрирует его практическую эффективность и актуальность для будущих исследований в рамках программы SPD.

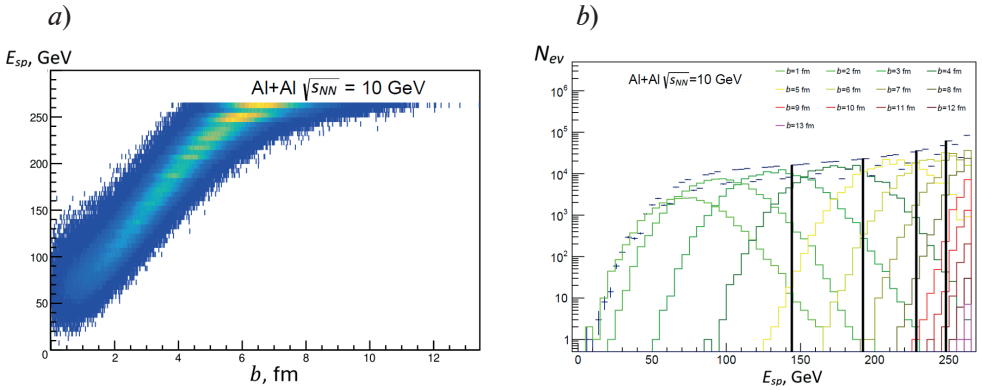


Рис. 5. Сравнение двумерной (*a*) и одномерной (*b*) гистограмм энерговыделения нуклонов-спектаторов E_{sp} в столкновениях Al + Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ:
a – распределения по значениям прицельного параметра *b* и по значениям энерговыделения нуклонов-спектаторов; *b* – одномерное распределение энерговыделения нуклонов-спектаторов по частоте событий. Вертикальными линями указаны границы классов центральности; цветные кривые соответствуют распределению E_{sp}, полученному при фиксированных значениях прицельного параметра *b* (см. легенду)

Использование методов машинного обучения для определения центральности столкновения

Поскольку наиболее распространенные методы определения центральности по множественности частиц (погрешность около 30%) и суммарному энерговыделению спектаторов-нуклонов (погрешность около 9%) в столкновении не гарантируют достаточной точности для ядро-ядерных столкновений, характеризующихся малой множественностью (таких как (Al + Al)-столкновения при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ), нами были рассмотрены другие наблюдаемые, на основе которых можно определять центральность.

На данном этапе работы были рассмотрены зависимости различных экспериментальных наблюдаемых от прицельного параметра столкновения *b*. В частности, была изучена зависимость среднего поперечного импульса $\langle p_T \rangle$ заряженных частиц от прицельного параметра столкновения (рис. 6). Установлено, что эта величина практически не зависит от параметра удара и, следовательно, она непригодна для поставленной цели – определения центральности. Вместе с тем получено расчетным путем, что среднее значение $\langle p_T \rangle$ составляет около 0,4 ГэВ; это позволило использовать указанную величину в качестве характерного масштаба для дальнейшего анализа.

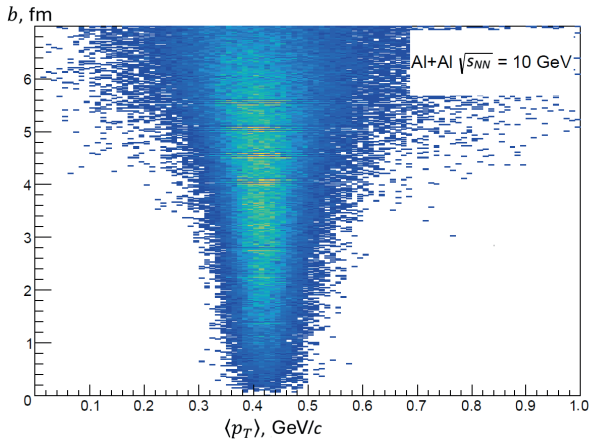


Рис. 6. Двумерная гистограмма – распределения среднего значения поперечного импульса $\langle p_T \rangle$ заряженных частиц по значениям прицельного параметра *b*, полученная для столкновений Al + Al при $\sqrt{s_{NN}}$ = 10 ГэВ

На основе полученного значения $\langle p_T \rangle \approx 0{,}4$ ГэВ, все заряженные частицы были условно разделены на две группы по признаку значения поперечного импульса: с $p_T < 0{,}4$ ГэВ и $p_T > 0{,}4$ ГэВ. Для удобства эти группы были названы «мягкими» и «жесткими» частицами, хотя в строгом физическом смысле такое разделение нельзя считать корректным. Было показано, что зависимости суммарного поперечного импульса, а также множественностей мягких и жестких частиц от прицельного параметра носят характер, близкий к линейному (рис. 7). При этом различные наклоны этих зависимостей указывают на то, что эти величины несут независимую информацию о геометрии столкновения и могут рассматриваться как отдельные экспериментальные наблюдаемые.

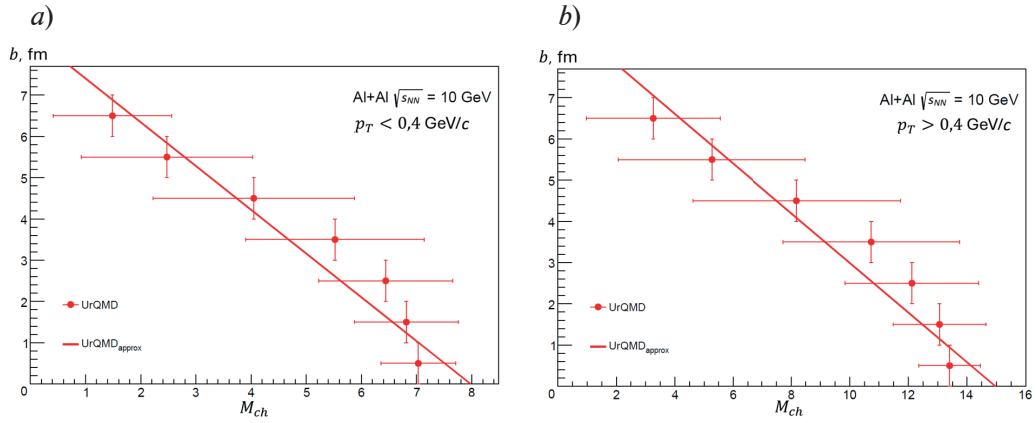


Рис. 7. Зависимости величины множественности от значений прицельного параметра b для частиц, обладающих $p_T < 0{,}4$ ГэВ (a) и $p_T > 0{,}4$ ГэВ (b); зависимости получены для столкновений Al+Al при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ

Величины M_{ch}, E_{sp}, суммарный поперечный импульс p_T, а также множественности «мягких» ($p_T < 0{,}4$ ГэВ) и «жестких» ($p_T > 0{,}4$ ГэВ) частиц были использованы в качестве входных параметров для классификатора на основе машинного обучения «дерево решений» [12]. Выбор данного метода был продиктован рядом его преимуществ:

простота понимания и интерпретации;

возможность наглядной визуализации структуры дерева;

минимальные требования к предварительной подготовке данных;

использование модели типа «белый ящик», в рамках которой логика принятия решений легко интерпретируется с помощью булевой алгебры.

В рамках данной работы были рассмотрены только три класса центральности (%):

$$0 - 30,\ 30 - 60,\ 60 - 90$$

(ультрапериферические столкновения были выделены в отдельный класс и не использовались при обучении дерева решений). Алгоритм определения центральности столкновений Al + Al при $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ с использованием классификатора «дерево решений» показан на рис. 8.

Приводим набор экспериментальных наблюдаемых, используемых классификатором на основе дерева решений на различных уровнях (слоях) принятия решения (пошаговый перечень параметров предложенного алгоритма:

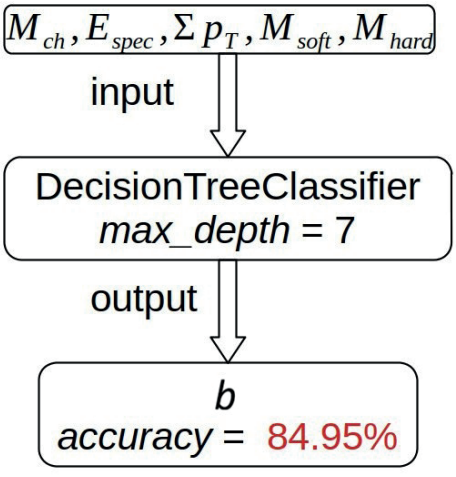


Рис. 8. Алгоритм определения центральности столкновений Al+Al при $\sqrt{s_{NN}} = 10$ ГэВ с использованием классификатора «дерево решений»

1. Энергия нуклонов-спектаторов
2. Энергия нуклонов-спектаторов
3. Энергия нуклонов-спектаторов,
   Множественность заряженных частиц

4. Энергия нуклонов-спектаторов,
   Множественность заряженных частиц
   Полный поперечный импульс p_T

5. Энергия нуклонов-спектаторов,
   Множественность заряженных частиц
   Полный поперечный импульс p_T
   Импульс «жестких» и «мягких» частиц

. . . . . .

8. РЕЗУЛЬТАТ

Результаты применения дерева решений показали, что наиболее значимым признаком для классификации выступает энергия,

выделяемая нуклонами-спектаторами. Именно эта величина используется классификатором на первом и втором уровнях дерева. Далее по степени значимости следуют множественность заряженных частиц и суммарный поперечный импульс. Начиная примерно с пятого уровня, алгоритм дополнительно использует информацию о множественностях «мягких» и «жестких» частиц для уточнения принятого решения.

Оставшаяся неточность классификации может быть обусловлена флуктуациями экспериментальных наблюдаемых при фиксированном значении прицельного параметра, а не ограничениями самого метода дерева решений. Данный аспект в настоящее время является предметом дальнейшего исследования.

В результате применения классификатора на основе дерева решений удалось выделить наиболее важные признаки для определения центральности и достичь точности классификации на уровне 85,95%. Полученная погрешность, по-видимому, в основном обусловлена флуктуациями экспериментальных наблюдаемых при фиксированной геометрии столкновения, а не ограничениями процедуры обучения самого классификатора, что, однако, требует дополнительного количественного анализа.

Заключение

В настоящей работе исследована применимость традиционных методов определения центральности, основанных на измерении множественности заряженных частиц и энергии, уносимой нуклонами-спектаторами, в условиях эксперимента SPD. Показано, что оба подхода можно применять для классификации событий, однако обладают ограниченной точностью. Для метода, основанного на множественности заряженных частиц M_{ch}, характерная погрешность составляет порядка 30%, тогда как метод, использующий энерговыделение нуклонов-спектаторов E_{sp}, обеспечивает существенно более высокую точность с относительной ошибкой около 9%.

Кроме того, рассмотрена возможность повышения точности определения центральности за счет одновременного использования набора экспериментальных наблюдаемых и методов машинного обучения. Применение классификатора на основе дерева решений с максимальной глубиной 7 и использованием таких признаков, как M_{ch}, E_{sp}, суммарный поперечный импульс p_T, а также множественности «мягких» ($p_T < 0{,}4$ ГэВ) и «жестких» ($p_T > 0{,}4$ ГэВ) частиц позволило достичь точности классификации центральности на уровне 85,95%. Полученные результаты демонстрируют перспективность комбинированного подхода и возможность дальнейшего улучшения определения центральности в эксперименте SPD.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Miller M. L., Reygers K., Sanders S. J., Steinberg P.** Glauber modeling in high-energy nuclear collisions // Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2007. Vol. 57. January. Pp. 205–243.

2. **Abelev B., Adam J., Adamova D., et al.** (ALICE Collaboration). Centrality determination of Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV with ALICE // Physical Review C. 2013. Vol. 88. No. 4. P. 044909.

3. **Abelev B., Adam J., Adamova D., et al.** (ALICE Collaboration). Centrality dependence of particle production in *p*-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV // Physical Review C. 2015. Vol. 91. No. 6. P. 064905.

4. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration). Centrality categorization for $R_p(d)$ + A in high-energy collisions // Physical Review C. 2014. Vol. 90. No. 3. P. 034902.

5. **Adler C., Denisov A., Garcia E., Murray M., Stroebele H., White S.** The RHIC zero degree calorimeter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2001. Vol. 470. No. 3. Pp. 488–499.

6. **Allen M., Bennett M., Bobrek M., et. al.** (PHENIX Collaboration) PHENIX inner detectors // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 549–559.

7. **Kagamaster S., Reed R., Lisa M.** Centrality determination with a forward detector in the RHIC Beam Energy Scan // Physical Review C. 2021. Vol. 103. No. 4. P. 044902.

8. **Adcox K., Adler S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX detector overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 469–479.

9. **Ackermann K. H., Adams. N., Adler C., et al.** (STAR Collaboration). STAR detector overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 624–632.
10. **Aamodt K., Abrahantes Quintana A., Achenbach R., et al.** (ALICE Collaboration). The ALICE experiment at the CERN LHC // Journal of Instrumentation. 2008. Vol. 3. No. 8. P. S08002.
11. **Abazov V., Abramov V., Afanasyev L., et al.** (SPD Collaboration). Technical design report of the spin physics detector at NICA // Natural Science Review. 2024. Vol. 1. No. 1. P. 1.
12. **Quinlan J. R.** Induction of decision trees // Machine Learning. 1986. Vol. 1. No. 1. Pp. 81–106.

REFERENCES

1. **Miller M. L., Reygers K., Sanders S. J., Steinberg P.,** Glauber modeling in high-energy nuclear collisions, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 57 (Jan) (2007) 205–243.
2. **Abelev B., Adam J., Adamova D., et al.** (ALICE Collaboration), Centrality determination of Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 2.76 TeV with ALICE, Phys. Rev. C. 88 (4) (2013) 044909.
3. **Abelev B., Adam J., Adamova D., et al.** (ALICE Collaboration), Centrality dependence of particle production in *p*-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 5.02 TeV, Phys. Rev. C. 91 (6) (2015) 064905.
4. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration), Centrality categorization for $R_p(d)$ + A in high-energy collisions, Phys. Rev. C. 90 (3) (2014) 034902.
5. **Adler C., Denisov A., Garcia E., et. al.,** The RHIC zero degree calorimeter, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 470 (3) (2001) 488–499.
6. **Allen M., Bennett M., Bobrek M., et. al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX inner detectors, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 549–559.
7. **Kagamaster S., Reed R., Lisa M.,** Centrality determination with a forward detector in the RHIC beam energy scan, Phys. Rev. C. 103 (4) (2021) 044902.
8. **Adcox K., Adler S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX detector overview, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 469–479.
9. **Ackermann K. H., Adams N., Adler C., et al.** (STAR Collaboration), STAR detector overview, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 624–632.
10. **Aamodt K., Abrahantes Quintana A., Achenbach R., et al.** (ALICE Collaboration), The ALICE experiment at the CERN LHC, J. Instrum. 3 (8) (2008) S08002.
11. **Abazov V., Abramov V., Afanasyev L., et al.** (SPD Collaboration), Technical design report of the spin physics detector at NICA, Nat. Sci. Rev. 1 (1) (2024) 1.
12. **Quinlan J. R.,** Induction of decision trees, Mach. Learn. 1 (1) (1986) 81–106.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛАРИОНОВА Дарья Максимовна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dashalario@gmail.com
ORCID: 0009-0007-7019-5586

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

КОТОВ Дмитрий Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

ТРУШКОВ Дмитрий Алексеевич – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
trushkoov@yandex.ru

THE AUTHORS

LARIONOVA Daria M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dashalario@gmail.com
ORCID: 0009-0007-7019-5586

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

KOTOV Dmitry O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

TRUSHKOV Dmitriy A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
trushkoov@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 18.02.2026. Одобрена после рецензирования 08.04.2026. Принята 08.04.2026.
Received 18.02.2026. Approved after reviewing 08.04.2026. Accepted 08.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 539.125.4, 539.126.3
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19312

АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ РОЖДЕНИЯ ИДЕНТИФИЦИРОВАННЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ АДРОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР КСЕНОНА И ВОЛЬФРАМА ПРИ ЭНЕРГИИ 2,5*A* ГэВ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИ BLAST-WAVE

Д. М. Ларионова ✉, Я. А. Бердников, Д. О. Котов, Д. В. Неумин
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ dashalario@gmail.com

Аннотация. Представлен метод анализа инвариантных спектров заряженных адронов в области больших барионных химических потенциалов, ориентированный на будущие измерения эксперимента MPD. В рамках модели blast-wave были проанализированы инвариантные спектры идентифицированных заряженных адронов $\pi^{\pm}$, $K^{\pm}$ и протонов p (данные опубликованы ранее), полученные в столкновениях Xe+W при энергии 2,5*A* ГэВ в пакете MPDroot с генератором UrQMD; также рассчитаны отношения выходов мезонов π^+/π^- и K^+/K^-. Рассмотрена применимость модели blast-wave для описания столкновений Xe+W при энергии 2,5*A* ГэВ. На основе интегральных отношений выходов частиц оценены значения химических потенциалов их заряда и странности. Полученные результаты свидетельствуют о наличии значительного барионного заряда в центральной области столкновения и, как следствие, о существенной барионной остановке.

Ключевые слова: заряженный адрон, инвариантный спектр, отношение выходов мезонов, химический потенциал, быстрота, барион

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Неумин Д. В. Анализ особенностей рождения идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона и вольфрама при энергии 2,5*A* ГэВ с помощью модели blast-wave // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 150–161. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19312

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19312

AN ANALYSIS OF IDENTIFIED CHARGED HADRON PRODUCTION IN Xe + W COLLISIONS AT 2.5*A* GeV USING THE BLAST-WAVE MODEL

D. M. Larionova ✉, Ya. A. Berdnikov, D. O. Kotov, D. V. Neumin
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ dashalario@gmail.com

Abstract. A method for analyzing invariant spectra of charged hadrons in the region of high baryon chemical potentials is presented, aimed at future measurements of the MPD experiment. Within the framework of the blast-wave model, previously published invariant spectra of identified charged hadrons ($\pi^{\pm}$, $K^{\pm}$, and p), obtained in Xe+W collisions at an energy of 2.5*A* GeV using the MPDroot package with the UrQMD generator, were analyzed, and the particle ratios π^+/π^- and K^+/K^- were calculated. The applicability of the blast-wave model to the

© Ларионова Д. М., Бердников Я. А., Котов Д. О., Неумин Д. В., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

description of Xe+W collisions at the energy of 2.5A GeV was investigated. Chemical potentials were estimated from the integrated particle ratios. The obtained values indicated a substantial baryon density in the central region of the collision and, consequently, significant baryon stopping. The results are of a methodological nature and can be used to assess the applicability of standard approaches in the analysis of future MPD experimental data.

Keywords: MPD, NICA, STAR, QGP, blast-wave, phase diagram, nucleat matter, baryon stopping

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Neumin D. V., An analysis of identified charged hadron production in Xe + W collisions at 2.5A GeV using the blast-wave model, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 150–161. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19312

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

Введение

Изучение фазовой диаграммы ядерной материи остается одной из ключевых задач современной физики высоких энергий. В области, соответствующей высоким температурам (порядка $T \approx 150 - 170$ МэВ) и малым значениям барионного химического потенциала ($\mu_B \approx 0$), переход адронной материи в кварк-глюонную плазму носит характер кроссовера, при котором термодинамические величины изменяются непрерывно [1, 2]. В этих условиях свойства системы надежно описываются расчетами квантовой хромодинамики (КХД) на решетке [2], а динамика образующейся среды в ультрарелятивистских столкновениях тяжелых ионов – релятивистской гидродинамикой с начальными условиями типа Бьёркена [3]. Экспериментально эта область подробно исследована в экспериментах PHENIX [4, 5] и STAR [6] при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ, а также в ALICE [7] при энергиях до нескольких ТэВ.

В противоположность этому, область фазовой диаграммы, которая характеризуется высокими значениями барионного химического потенциала ($\mu_B \approx 400$ МэВ) и умеренными температурами ($T \approx 100$ МэВ), остается существенно менее изученной. Теоретическое описание здесь затруднено из-за так называемой «знаковой проблемы» в решеточной КХД [8], а экспериментальные данные ограничены. Тем не менее именно в этой области ожидается фазовый переход первого рода между адронной материей и кварк-глюонной плазмой, который сопровождается скачкообразными изменениями наблюдаемых величин и восстановлением киральной симметрии [9]. Кроме того, предполагается существование критической точки, разделяющей области кроссовера и фазового перехода первого рода, однако вопрос о ее наличии и положении остается открытым [9].

Существенный вклад в экспериментальное изучение области высоких барионных плотностей внес эксперимент STAR в рамках программы Beam Energy Scan (BES I и BES II), в ходе которой были исследованы столкновения Au + Au в диапазоне энергий $\sqrt{s_{NN}} \approx 3 - 60$ ГэВ. Одним из наиболее обсуждаемых результатов стало наблюдение немонотонного поведения отношения K^+/π^+ с максимумом («рогом») вблизи $\sqrt{s_{NN}} \approx 7 - 10$ ГэВ [10]. Кроме того, параметры кинетического вымораживания, извлекаемые из аппроксимации спектров адронов в гидродинамических моделях, демонстрируют поведение, которое согласуется с возможным наличием смешанной фазы: температура вымораживания выходит на плато в области низких энергий и затем возрастает с увеличением энергии столкновения. Такое поведение может интерпретироваться как косвенное указание на фазовый переход первого рода [10, 11].

В рамках программы BES коллаборации STAR интерпретация спектров частиц, как правило, опирается на предположение о приближенной инвариантности системы относительно продольных Лоренцевых преобразований. Такое поведение соответствует

© Larionova D. M., Berdnikov Ya. A., Kotov D. O., Neumin D. V., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

продольному расширению системы, называемому буст-инвариантным (условия Бьёркена) [1, 3], который успешно применялся при анализе данных ультрарелятивистских столкновений при энергиях $\sqrt{s_{NN}} \approx 200$ ГэВ. Однако при низких энергиях применимость этого предположения может оказаться ограниченной вследствие существенной барионной остановки (baryon stopping) [12]: значительная часть барионного заряда остается в центральной области столкновения, а не уходит в область больших быстрот.

Дополнительно барионная остановка, приводящая к накоплению барионного заряда в центральной области, усиливает влияние изоспиновой асимметрии тяжелых ядер [12]. В условиях высокой барионной плотности это приводит к неравновесному распределению зарядов между различными типами адронов и, в частности, влияет на соотношение выходов заряженных частиц. Таким образом, изоспиновая асимметрия выступает дополнительным фактором, затрудняющим применение подходов, разработанных для высоких энергий. В совокупности с барионной остановкой эффекты изоспина указывают на возможное отклонение системы от буст-инвариантного режима и, следовательно, на ограниченную применимость моделей, основанных на условиях Бьёркена.

Таким образом, область больших значений барионных химических потенциалов представляет собой сложную задачу, в которой становятся значимыми эффекты, пренебрежимо малые при высоких энергиях, что подчеркивает необходимость получения новых экспериментальных данных.

Одним из ключевых проектов, нацеленных на изучение особенностей данной области, является эксперимент MPD (Multi-Purpose Detector) [13] по мегапроекту NICA (коллайдер в наукограде Дубне Московской области [14]). Он ориентирован на исследование столкновений тяжелых ионов в диапазоне энергий $\sqrt{s_{NN}} \approx 3 - 11$ ГэВ, что соответствует области максимальных барионных плотностей [15]. На начальном этапе планируются эксперименты в режиме фиксированной мишени, в частности столкновения ядер ксенона и вольфрама (Xe + W) при энергии, соответствующей $\sqrt{s_{NN}} = 2{,}8$ ГэВ. Эти условия близки к параметрам столкновений ядер золота (Au + Au, симметричная система) при $\sqrt{s_{NN}} \approx 3$ ГэВ, исследованных в программе BES II (Beam Energy Scan II), однако использование несимметричной системы открывает дополнительные возможности для изучения влияния начальной геометрии столкновения на величину барионной остановки.

Предполагается, что степень барионной остановки чувствительна к геометрии сталкивающихся ядер. В этом контексте особый интерес представляет исследование несимметричных систем, таких как Xe + W. При этом близость отношений Z/A (Z, A – зарядовое и массовое числа, соответственно) в системах Xe + W и Au + Au позволяет минимизировать вклад изоспиновых эффектов и тем самым более надежно выделять влияние геометрии на динамику барионной остановки.

В настоящее время экспериментальные данные для установки MPD отсутствуют, и исследования проводятся на основе моделирования с использованием программного пакета MPDroot [13], включающего генератор UrQMD [16] и детальное воспроизведение отклика детекторной системы. Следует отметить, что большинство доступных вычислений выполнено в каскадном режиме UrQMD без учета гидродинамической эволюции, что обусловлено высокой вычислительной сложностью гидродинамических расчетов. В этой работе также используются данные статьи [17], полученные в каскадном режиме UrQMD.

В указанных условиях настоящее исследование направлено на разработку методики анализа спектров идентифицированных адронов в области низких энергий. В частности, спектры аппроксимируются в рамках стандартного гидродинамически мотивированного подхода (модель blast-wave [18]), что позволяет обеспечить сопоставимость с результатами программы BES эксперимента STAR (Solenoid Tracker at RHIC), который реализуется на ускорителе RHIC в Брукхейвенской национальной лаборатории (США). Одновременно проводится анализ отношений частиц и извлечение химических потенциалов, что дает возможность оценить применимость данного подхода в рассматриваемой области энергий.

Предлагаемый подход основан на анализе результатов моделирования и может быть в дальнейшем использован при обработке экспериментальных данных MPD.

Полученные результаты носят методический характер и не претендуют на непосредственную физическую интерпретацию. Вместе с тем их сопоставление с данными

программы BES позволяет оценить корректность работы генератора UrQMD и применимость используемых подходов моделирования в области низких энергий.

Модель blast-wave

Область применения. Поскольку в области высоких барионных плотностей применение расчетов квантовой хромодинамики на решетке существенно ограничено, для описания экспериментальных данных используются статистические (термодинамические) и гидродинамически мотивированные подходы [1]. Термодинамические модели основаны на предположении термодинамического равновесия и не требуют формирования кварк-глюонной плазмы, тогда как гидродинамически мотивированные подходы предполагают наличие коллективного расширения среды.

Одной из наиболее распространенных моделей, основанных на релятивистской гидродинамике, является модель «взрывной волны» (blast-wave model) [18], применяемая для аппроксимации инвариантных спектров частиц по поперечному импульсу p_T или массе m_T и извлечения эффективных параметров системы (температуры кинетического вымораживания T и средней скорости коллективного расширения β_T). Она успешно воспроизводит форму p_T-спектров частиц в ультрарелятивистских столкновениях тяжелых ионов при энергиях коллайдеров RHIC (*англ.* The Relativistic Heavy Ion Collider) на энергию 200 ГэВ и LHC (*англ.* Large Hadron Collider) на энергию порядка ТэВ. Несмотря на ограничения при низких энергиях, связанные с возможным нарушением условий Бьёркена, данный подход продолжают использовать и, в частности, его применяют при анализе данных программы BES коллаборации STAR [10, 11, 19].

Физическую картину, лежащую в основе модели, можно описать следующим образом. После столкновения ионов формируется горячая и плотная система, которая быстро достигает локального термодинамического равновесия и далее эволюционирует гидродинамически. Вследствие неоднородного распределения энергии и давления возникает градиент давления, максимальный в центральной области и уменьшающийся к периферии. Этот градиент приводит к коллективному радиальному расширению системы, интерпретируемому как «взрывная волна».

В модели blast-wave предполагается, что образование частиц происходит на некоторой гиперповерхности в пространстве-времени. Частицы покидают систему при фиксированной температуре T, а их импульсные распределения определяются коллективным движением среды, которое описывается четырехскоростью $u^{\mu}(x)$. Для расчета спектров частиц используется формула Купера – Фрая [20]:

$$E\frac{d^3N}{dp^3} = \frac{g}{(2\pi)^3}\int \exp\left(-\frac{u^{\nu}p_{\nu}}{T}\right)p^{\mu}d\sigma_{\mu}, \qquad (1)$$

где p^{μ} – четырехимпульс частицы, $u^{\nu} = (t/\tau, u_r, u_{\varphi}, u_z)$ – четырехскорость среды, T – эффективная температура системы, $d\sigma_{\mu}$ – элемент гиперповерхности.

Коллективное движение и условия Бьёркена

Важным элементом гидродинамического описания столкновений тяжелых ионов является задание начальных условий, определяющих пространственно-временные распределения энергии, барионной плотности и коллективных скоростей на ранней стадии эволюции системы [1]. Эти условия существенно зависят от энергии столкновения и степени барионной остановки, т.е. от того, какая доля продольного импульса налетающих нуклонов теряется в центральной области взаимодействия.

При относительно низких энергиях, когда барионная остановка значительна, применима гидродинамическая модель Ландау [21]. В этом случае предполагается, что налетающие ядра практически полностью теряют продольный импульс, а энергия столкновения локализуется в области перекрытия ядер. Начальное состояние системы близко к покоящемуся в системе центра масс и характеризуется сильными продольными градиентами давления, что приводит к последующему интенсивному продольному расширению. В рамках этого подхода распределение частиц по быстроте имеет форму, близкую к Гауссовой [1].

При высоких энергиях, напротив, барионная остановка существенно ослабляется, и значительная часть нуклонов сохраняет свою продольную быстроту, покидая центральную область. В этих условиях применим подход Бьёркена [3], в котором предполагается приближенная инвариантность системы относительно продольных Лоренцевых преобразований (буст-инвариантность): переход от одной области быстрот к другой эквивалентен смене системы отсчета и не приводит к изменению локальных характеристик среды. Это означает, что процессы рождения частиц протекают одинаково в широком интервале быстрот и не выделяют предпочтительной продольной области, т.е. кривая распределения частиц по быстроте имеет плато. В этих условиях продольная быстрота потока частиц

$$y_L = \frac{1}{2}\ln\frac{t+u_z}{t-u_z}$$

определяется пространственно-временной быстротой

$$\eta_S = \frac{1}{2}\ln\frac{t+z}{t-z},$$

что приводит к соотношению $y_L = \eta_s$.

Таким образом, модели Ландау и Бьёркена задают два качественно различных типа начальных условий, соответствующих сильной и слабой барионной остановкам, соответственно. В реальных столкновениях, особенно в области промежуточных энергий, реализуется ситуация с частичной остановкой нуклонов, при которой ни одно из этих приближений не относится к строго применимым, и требуется более общее описание начальной стадии.

В стандартной реализации blast-wave используется приближение Бьёркена. Дополнительно предполагается, что гиперповерхность задается условием $\tau = \sqrt{t^2 - z^2} = \text{const}$ (τ — собственное время). Именно эти два предположения – $y_L = \eta_s$ и $\tau = \text{const}$ – лежат в основе применения условий Бьёркена в модели blast-wave.

Подстановка условий $y_L = \eta_s$ и $\tau = \text{const}$ в формулу Купера – Фрая [20] и интегрирование по пространственно-временной быстроте η_s приводит к стандартному аналитическому виду спектра:

$$\frac{dN}{m_T dm_T} = C\int_0^R r dr m_T I_0\left(\frac{p_T \sinh\rho}{T_0}\right) K_1\left(\frac{p_T \cosh\rho}{T_0}\right), \qquad (2)$$

где m_T – поперечная масса, $m_T = \sqrt{{p_T}^2 + {m_0}^2}$; T – температура кинетического вымораживания; R – радиус области перекрытия ядер; I_0, K_1 – модифицированные функции Бесселя; причем β_T — средняя скорость расширения радиального потока.

Ограничения применимости модели при низких энергиях

Несмотря на успех модели при высоких значениях энергии, ее применение в области низких энергий требует осторожности. При энергиях коллайдеров RHIC и LHC в центральной области быстрот наблюдается приближенная буст-инвариантность, а барионный заряд в значительной степени уносится в области высоких значений их быстроты. В результате в области центральных быстрот ($y \approx 0$) система оказывается почти барионно-симметричной и барионный химический потенциал μ_B мал. В этих условиях предположение $y_L = \eta_s$ служит хорошим приближением, а стандартная версия blast-wave дает корректное описание поперечных спектров.

Ситуация существенно меняется при понижении энергии столкновения. В этом случае возрастает эффект барионной остановки: значительная часть барионного заряда не уходит в область больших быстрот, а остается в центральной области столкновения. Это приводит к нижеперечисленным последствиям:

нарушается буст-инвариантность продольного расширения;

продольная быстрота потока уже не совпадает с пространственно-временной быстротой ($y_L \neq \eta_s$);

возникает существенная зависимость термодинамических параметров от быстроты;

барионный химический потенциал μ_B становится большим и существенно влияет на распределения частиц.

В таких условиях исходные предположения модели blast-wave перестают быть строго обоснованными. В частности, аналитическая форма спектра с функциями Бесселя (см. формулу (2)) уже не следует из корректного описания динамики, а становится лишь эффективной параметризацией.

Тем не менее, несмотря на эти ограничения, стандартный вариант blast-wave продолжает использоваться для аппроксимации экспериментальных данных, в том числе в экспериментах коллаборации STAR в рамках программ BES-I и BES-II [10, 11, 19]. Это связано с тем, что модель остается удобным инструментом для извлечения эффективных параметров, однако интерпретация этих параметров при низких энергиях требует особой осторожности.

Анализ инвариантных спектров заряженных адронов с помощью модели blast-wave

Инвариантные спектры по поперечному импульсу, полученные в работе [17] с использованием пакета MPDroot для идентифицированных заряженных адронов $\pi^{\pm}$, $K^{\pm}$ и p в столкновениях Xe + W при энергии 2,5A ГэВ в различных классах центральности, были аппроксимированы в рамках стандартной модели blast-wave. На основе проведенной аппроксимации сделана оценка параметров температуры кинетического вымораживания T и средней скорости радиального расширения β_T.

На рис. 1 представлены зависимости параметров T и β_T от центральности для различных типов частиц. Видно, что значения температуры кинетического вымораживания, полученные из спектров различных адронов, совпадают (в пределах статистических погрешностей) и составляют в среднем около 100 МэВ. Такой результат согласуется с предположением модели blast-wave о единой гиперповерхности вымораживания для всех типов частиц.

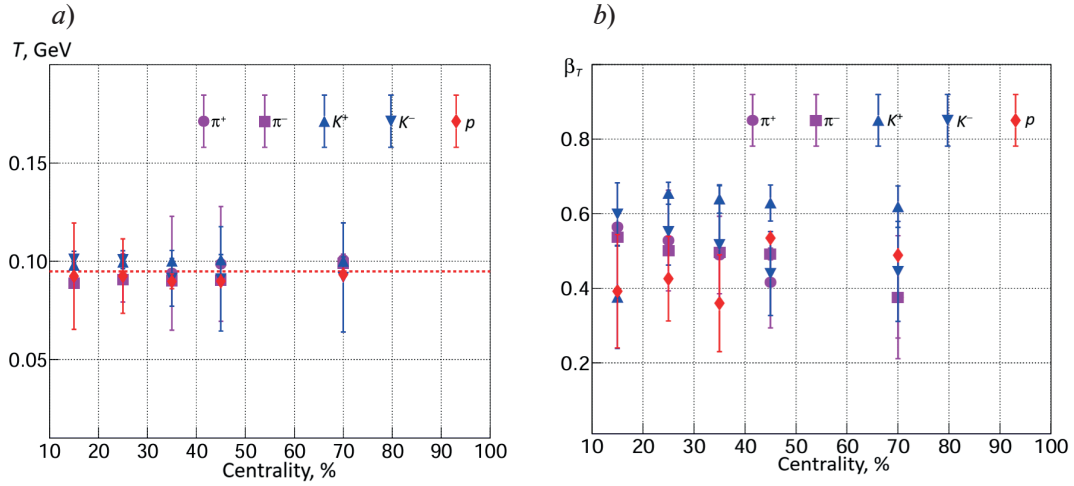


Рис. 1. Зависимости от центральности параметров модели blast-wave, извлеченных путем аппроксимации спектров идентифицированных заряженных адронов в столкновениях Xe + W.

T – температура кинетического вымораживания, красная точечная линия соответствует среднему значению $T \approx 94$ МэВ (*a*);

β_T – средняя скорость радиального расширения (*b*)

В отличие от температуры T, значения скорости β_T демонстрируют более выраженный разброс. При этом значения параметров, полученных из спектров $\pi^{\pm}$, K^{-} и p, согласуются между собой в пределах погрешностей. Однако значения β_T, полученные для каонов K^{+}, систематически превышают соответствующие значения для остальных частиц.

Наблюдаемое расхождение может указывать как на особенности описания процессов рождения K^{+} в генераторе UrQMD при данной энергии, так и на возможные ограничения применимости стандартной модели blast-wave в рассматриваемых условиях. В этом смысле различие в результатах для K^{+} представляет особый интерес как потенциальный индикатор отклонения системы от предположений, заложенных в модели.

Анализ отношений выходов адронов и определение их химических потенциалов заряда и странности

Для дополнительной проверки применимости модели blast-wave и анализа эффектов, связанных с нарушением условий буст-инвариантности, были исследованы отношения выходов заряженных адронов. В частности, рассмотрены отношения π^+/π^- и K^+/K^-, чувствительные к зарядовому химическому потенциалу μ_Q и химическому потенциалу странности μ_S.

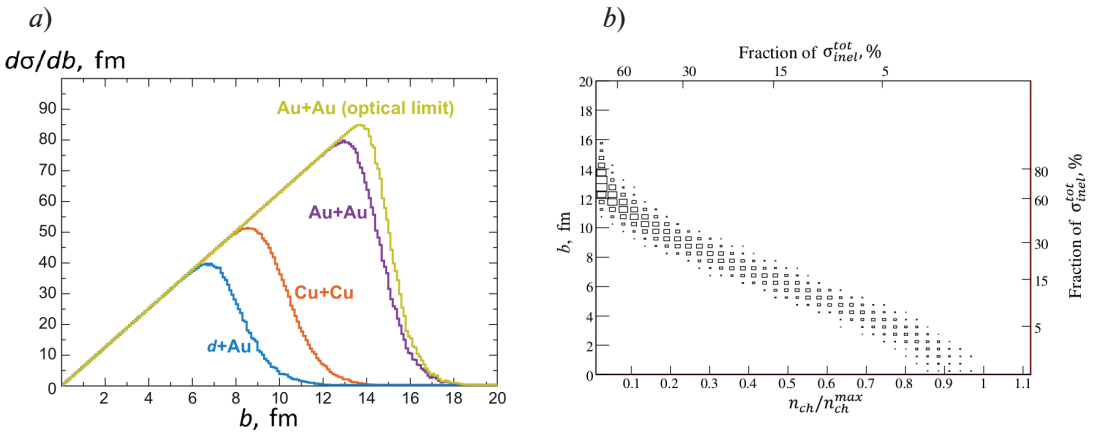


Рис. 2. Экспериментальные (черные звездочки), смоделированные (цветные символы) и аппроксимирующие (сплошная линия) зависимости отношений выходов мезонов π^+/π^- (*a*) и K^+/K^- (*b*) от поперечной массы $m_T - m_0$ для различных классов центральности. Представлены результаты моделирования столкновений Xe+W при $\sqrt{s_{NN}}$ = 2,87 ГэВ [17] (*a*, *b*), результаты эксперимента STAR для системы Au + Au при $\sqrt{s_{NN}}$ = 3,00 ГэВ [10, 11] (*b*) и аппроксимация отношения π^+/π^- в рамках модели, учитывающей вклад кулоновского потенциала, обусловленного накоплением протонов в центральной области столкновения (*a*)

Полученные зависимости этих отношений от поперечной массы представлены на рис. 2 для различных классов центральности столкновений Xe + W, а также в сравнении с результатами для столкновений Au + Au при $\sqrt{s_{NN}}$ = 3 ГэВ, измеренными в эксперименте STAR [10, 11].

Анализ данных на рис. 2 показывает, что значения отношений π^+/π^-, полученные с помощью моделирования в MPDroot, систематически превышают единицу и демонстрирует зависимость от поперечной массы, тогда как значения отношений π^+/π^-, полученные в эксперименте STAR, ближе к единице и менее выраженно зависят от кинематических переменных. Это может указывать на различия в моделировании зарядового состава системы и требует дополнительной проверки генератора UrQMD.

Отношение K^+/K^- демонстрирует сильную зависимость от поперечной массы, что нетипично для термодинамического описания и может свидетельствовать о сложной динамике рождения каонов при данной энергии. Важно отметить, что параметры β_T, извлеченные именно из спектров K^+, существенно отличаются от таковых, полученных путем аппроксимации $\pi^\pm$, K^- и p. Это может указывать на несогласованность формы спектра, относящегося к каонам K^+, с описанием спектров других адронов в рамках параметризации с общими значениями температуры T и β_T; это, в свою очередь, может свидетельствовать об особенностях моделирования с помощью UrQMD процессов рождения положительных каонов, а значит требует дополнительной проверки.

Значения отношения K^+/K^-, полученные через UrQMD, сопоставимы с экспериментальными данными STAR в области перекрытия по кинематике, однако этого недостаточно для надежной оценки воспроизведения зависимости от m_T, поскольку измерения в эксперименте выполнены в ограниченном диапазоне поперечной массы.

Для количественной оценки эффектов барионной остановки, на основе полученных отношений частиц были вычислены химические потенциалы заряда μ_Q и странности μ_S.

В предположении теплового равновесия отношения интегральных выходов частиц связаны с химическими потенциалами соотношениями следующего вида:

$$\frac{\pi^+}{\pi^-} \sim \exp\left(\frac{2\mu_Q}{T}\right), \frac{K^+}{K^-} \sim \exp\left(\frac{2\left(\mu_Q - \mu_S\right)}{T}\right). \quad (3)$$

Установлено, что химические потенциалы демонстрируют систематическую зависимость от центральности: значения μ_Q изменяются в диапазоне от −19,7 до −14,5 МэВ, а μ_S – от 160,9 до 175,5 МэВ, достигая наибольших значений в периферических столкновениях. Отрицательные значения μ_Q (значительные по модулю) указывают на избыток положительного барионного заряда в центральной области столкновения. Это свидетельствует о том, что существенная часть протонов не смещается в область больших быстрот, а остается в зоне взаимодействия, что приводит к перераспределению заряда между адронами. В частности, отрицательно заряженные пионы оказываются более вероятными носителями заряда, чем положительные.

Такой результат соответствует эффекту барионной остановки, характерному для низких энергий, и указывает на отклонение системы от условий Бьёркена, предполагающих отсутствие значительной барионной плотности в центральной области быстрот.

Дополнительный вклад в наблюдаемые отношения частиц вносит изоспиновая асимметрия ядер, влияние которой усиливается вследствие накопления барионного заряда в центральной области быстрот. Для тяжелых ядер ксенона и вольфрама, в которых число нейтронов превышает число протонов, характерно преобладание *d*-кварков над *u*-кварками, что приводит к повышенной вероятности рождения отрицательно заряженных пионов π^-, по сравнению с положительно заряженными π^+. Сравнение с системой столкновения ядер золота (Au + Au), исследованной в эксперименте STAR, представляет особый интерес, поскольку близость отношения Z/A в этих системах позволяет минимизировать вклад изоспиновых эффектов и выделить влияние геометрии столкновения на барионную остановку.

Таким образом, анализ отношений частиц и полученных значений химических потенциалов демонстрирует чувствительность предложенной методики к эффектам барионной остановки и изоспиновой асимметрии. Полученные результаты указывают на отклонение системы от предположений буст-инвариантности, лежащих в основе стандартной модели blast-wave, и подтверждают необходимость проверки ее применимости в области низких энергий.

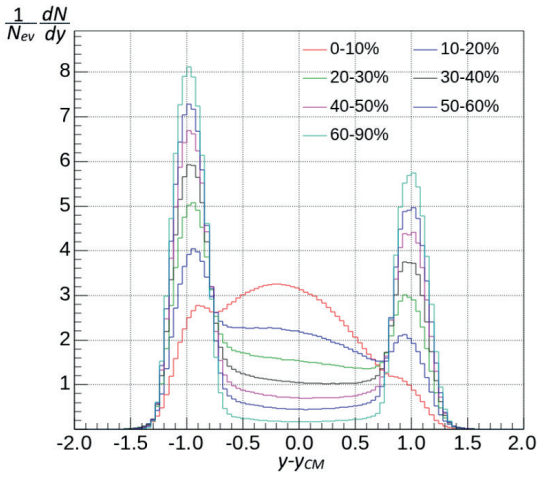


Рис. 3. Распределения частиц по быстроте, нормированные на число событий, полученные для различных центральностей столкновений Xe+W при $\sqrt{s_{NN}}$ =2,87 ГэВ (получены в пакете MPDroot с генератором UrQMD)

Распределения по быстроте

В качестве дополнительной характеристики величины барионной остановки были построены распределения протонов, образовавшихся в столкновении, по величине $y - y_{CM}$, где y – быстрота протонов в лабораторной системе, а y_{CM} – быстрота пучка в системе центра масс (рис. 3). Поскольку рассматриваемая система является несимметричной, анализ проводился в области положительных значений быстроты ($y - y_{CM} > 0$), соответствующей направлению движения налетающего ядра.

На основе полученных распределений были вычислены значения средней быстроты протонов $\langle y \rangle_{proj}$ и средней потери быстроты

$$\langle \delta y \rangle_{proj} = y_{beam} - \langle y \rangle_{proj},$$

где y_{beam} – быстрота сталкивающихся ядер в системе центра масс, y_{beam} = 0,99.

Низкое значение $\langle y \rangle_{proj}$ и, соответственно, высокое значение $\langle \delta y \rangle_{proj}$ указывают на сосредоточение значительной части частиц в области малых быстрот. Это свидетельствует о сильной барионной остановке, при которой налетающие нуклоны существенно теряют продольный импульс. Напротив, значения $\langle y \rangle_{proj} \approx y_{beam}$ и $\langle \delta y \rangle_{proj} \approx 0$ соответствуют ситуации, когда барионы сохраняют значительную часть своей начальной быстроты и смещаются в область больших быстрот, что приближает систему к условиям Бьёркена.

Для центральных столкновений (0 – 10%) получены значения $\langle y \rangle_{proj} = 0{,}43$, $\langle \delta y \rangle_{proj} = 0{,}56$. Полученные результаты указывают на существенную барионную остановку в столкновениях Xe + W. Такой вывод согласуется с экспериментальными результатами STAR Collaboration, где в столкновениях Au + Au при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 3$ ГэВ получены значения $\langle \delta y \rangle = 0{,}71$, интерпретируемые как проявление сильной барионной остановки [11].

Заключение

В работе представлен метод анализа инвариантных спектров заряженных адронов в области больших барионных химических потенциалов. Проведен анализ в рамках стандартной модели blast-wave спектров частиц $\pi^{\pm}$, $K^{\pm}$ и p, полученных в работе [17] для столкновений Xe + W с использованием пакета MPDroot с генератором UrQMD. Путем аппроксимации спектров извлечены значения температуры кинетического вымораживания T и средней скорости радиального расширения системы частиц β_T. Показано, что значения температуры T, полученные для различных типов адронов, совпадают (в пределах погрешностей), тогда как значения β_T согласуются для частиц $\pi^{\pm}$, K^- и p, но существенно различаются для положительных каонов K^+.

Дополнительно проанализировано поведение отношений π^+/π^- и K^+/K^- в зависимости от поперечного импульса и центральности столкновений, а также проведено сравнение с результатами эксперимента STAR. Полученные результаты указывают на возможные особенности моделирования положительных каонов в UrQMD, которые проявляются как в форме спектров, так и в поведении отношения K^+/K^-. Ограниченный диапазон измерений в эксперименте STAR не позволяет сделать однозначные выводы о корректности воспроизведения указанной зависимости от m_T.

При дальнейшем анализе на основе интегральных значений отношений частиц были оценены химические потенциалы заряда и странности. Полученные значения свидетельствуют о наличии значительного барионного заряда в центральной области столкновения, что указывает на существенный эффект барионной остановки. Этот вывод согласуется с результатами анализа распределений по быстроте.

Следует отметить, что в данной работе используются результаты моделирования в каскадном режиме UrQMD без учета гидродинамической эволюции, что ограничивает физическую интерпретацию полученных значений параметров и объясняет возможные отклонения от гидродинамически мотивированных моделей, таких как blast-wave. В этом смысле полученные результаты носят скорее методический характер.

Тем не менее, предложенный подход к анализу спектров и отношений частиц можно рекомендовать для использования при обработке экспериментальных данных установки MPD и служить инструментом для проверки применимости стандартных методов описания в области низких энергий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Vogt R.** Ultrarelativistic heavy-ion collisions. Amsterdam: Elsevier, 2007. 469 p.

2. **Karsch F.** Lattice QCD at high temperature and density (Chapter) // Plessas W., Mathelitsch L. (Eds.) Lectures on quark matter (Book Series “Lecture Notes in Physics”, Vol. 583). Berlin, Heidelberg: Springer, 2002. Pp. 209–249.

3. **Bjorken J. D.** Highly relativistic nucleus-nucleus collisions: The central rapidity region // Physical Review D. 1983. Vol. 27. No. 1. Pp. 140–151.

4. **Adcox K., Adler S. S., Aizama M. et al.** (PHENIX Collaboration). PHENIX detector overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 469–479.

5. **Adcox K., Adler S.S., Afanasyev S. et al.** (PHENIX Collaboration). Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC // Nuclear Physics A. 2005. Vol. 757. No. 1–2. Pp. 184–283.

6. **Ackermann K. H., Adams N., Adler C. et al.** (STAR Collaboration). STAR detector overview // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2003. Vol. 499. No. 2–3. Pp. 624–632.

7. **Acharya S., Adamová D., Adler A. et al.** (ALICE Collaboration). The ALICE experiment: A journey through QCD // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. 14 August. P. 813.

8. **De Forcrand P.** Simulating QCD at finite density // Proceedings of Science. The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory – Plenary (LAT2009). July 26–31, 2009. Peking University, Beijing, China. 2009. Vol. 091. P. 010.

9. **Stephanov M. A.** QCD phase diagram and the critical point // International Journal of Modern Physics A. 2005. Vol. 20. No. 19. Pp. 4387–4392.

10. **Adamczyk L., Adkins J. K., Agakishiev G., et al.** (STAR Collaboration). Bulk properties of the medium produced in relativistic heavy-ion collisions from the Beam Energy Scan program // Physical Review C. 2017. Vol. 96. No. 4. P. 044904.

11. **Kumar L.** (for the STAR Collaboration). Systematics of kinetic freeze-out properties in high energy collisions from STAR // Nuclear Physics A. 2014. Vol. 931. November. Pp. 1114–1119.

12. **Kimelman B.** Baryon stopping and associated production of mesons in Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 3.0 GeV at STAR // Acta Physica Polonica B. Proceeding Supplement. 2023. Vol. 16. No. 1. P. 1-A49.

13. **Abraamyan K. U., Afanasiev S. V., Alfeev V. S., et al.** (MPD Collaboration). The MPD detector at the NICA heavy-ion collider at JINR // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2011. Vol. 628. No. 1. Pp. 99–102.

14. **Kekelidze V. D., Lednicky R., Matveev V. A., Meshkov I. N., Sorin A. S., Trubnikov G. V.** Three stages of the NICA accelerator complex // Journal of Physics: Conference Series. 2016. Vol. 668. P. 012023.

15. **Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al.** (MPD Collaboration). Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA // The European Physical Journal A. 2022. Vol. 58. No. 7. P. 140.

16. **Petersen H., Steinheimer J., Burau G., et al.** Fully integrated transport approach to heavy-ion reactions with an intermediate hydrodynamic stage // Physical Review C. 2008. Vol. 78. No. 4. P. 044901.

17. **Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В.** Возможности измерения свойств идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5*A* ГэВ в детекторе MPD на ускорителе NICA // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 177–189.

18. **Schnedermann E., Sollfrank J., Heinz U. W.** Thermal phenomenology of hadrons from 200*A* GeV S + S collisions // Gutbrod H. H., Rafelski J. (Eds.) Particle production in highly excited matter. Boston: Springer, 1993. Pp. 175–206.

19. **Adam J., Adamczyk L., Adams J. R., et al.** (STAR Collaboration). Strange hadron production in Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 7.7, 11.5, 19.6, 27, and 39 GeV // Physical Review C. 2020. Vol. 102. No. 3. P. 034909.

20. **Cooper F., Frye G.** Single-particle distribution in the hydrodynamic and statistical thermodynamic models of multiparticle production // Physical Review D. 1974. Vol. 10. No. 1. Pp. 186–189.

21. **Belenkij S. Z., Landau L. D.** Hydrodynamic theory of multiple production of particles // Il Nuovo Cimento. 1956. Vol. 3. No. 1 supplement. Pp. 15–31.

REFERENCES

1. **Vogt R.,** Ultrarelativistic heavy-ion collisions, Elsevier, Amsterdam, 2007.

2. **Karsch F.,** Lattice QCD at high temperature and density (Ch.), In book: Plessas W., Mathelitsch L. (Eds.) Lectures on quark matter (Book Series “Lecture Notes in Physics”, Vol. 583), Springer, Berlin, Heidelberg (2002) 209–249.

3. **Bjorken J. D.,** Highly relativistic nucleus-nucleus collisions: The central rapidity region, Phys. Rev. D. 27 (1) (1983) 140–151.

4. **Adcox K., Adler S. S., Aizama M., et al.** (PHENIX Collaboration), PHENIX detector overview, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 469–479.

5. **Adcox K., Adler S. S., Afanasyev S. et al.** (PHENIX Collaboration), Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC, Nucl. Phys. A. 757 (1–2) (2005) 184–283.

6. **Ackermann K. H., Adams N., Adler C., et al.** (STAR Collaboration), STAR detector overview, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 499 (2–3) (2003) 624–632.

7. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration), The ALICE experiment: A journey through QCD, Eur. Phys. J. C. 2024. Vol. 84. P. 813.

8. **De Forcrand P.,** Simulating QCD at finite density, Proc. Sci.: The XXVII Int. Symp. on Lattice Field Theory – Plenary (LAT2009). July 26–31, 2009. Peking University, Beijing, China. 091 (2009) 010.

9. **Stephanov M. A.,** QCD phase diagram and the critical point, Int. J. Mod. Phys. A. 20 (19) (2005) 4387–4392.

10. **Adamczyk L., Adkins J. K., Agakishiev G., et al.** (STAR Collaboration), Bulk properties of the medium produced in relativistic heavy-ion collisions from the Beam Energy Scan program, Phys. Rev. C. 96 (4) (2017) 044904.

11. **Kumar L.** (for the STAR Collaboration), Systematics of kinetic freeze-out properties in high energy collisions from STAR, Nucl. Phys. A. 931 (Nov) (2014) 1114–1119.

12. **Kimelman B.,** Baryon stopping and associated production of mesons in Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 3.0 GeV at STAR, Acta Phys. Pol. B – Proc. Suppl. 16 (1) (2023) 1-A49.

13. **Abraamyan K. U., Afanasiev S. V., Alfeev V. S., et al. (**MPD Collaboration), The MPD detector at the NICA heavy-ion collider at JINR, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 628 (1) (2011) 99–102.

14. **Kekelidze V. D., Lednicky R., Matveev V. A., et al.,** Three stages of the NICA accelerator complex, J. Phys. Conf. Ser. 52 (2016) 012023.

15. **Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al.** (MPD Collaboration), Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA, Eur. Phys. J. A. 58 (7) (2022) 140.

16. **Petersen H., Steinheimer J., Burau G., et al.,** Fully integrated transport approach to heavy-ion reactions with an intermediate hydrodynamic stage, Phys. Rev. C. 78 (4) (2008) 044901.

17. **Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V.,** Feasibility to measure the properties of identified charged hadrons in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5*A* GeV in the MPD detector at the NICA collider, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 177–189 (in Russian).

18. **Schnedermann E., Sollfrank J., Heinz U. W.,** Thermal phenomenology of hadrons from 200*A* GeV S + S collisions, In book: Gutbrod H. H., Rafelski J. (Eds.) Particle production in highly excited matter, Springer, Boston (1993) 175–206.

19. **Adam J., Adamczyk L., Adams J. R., et al.** (STAR Collaboration), Strange hadron production in Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}$ = 7.7, 11.5, 19.6, 27, and 39 GeV, Phys. Rev. C. 102 (3) (2020) 034909.

20. **Cooper F., Frye G.,** Single-particle distribution in the hydrodynamic and statistical thermodynamic models of multiparticle production, Phys. Rev. D. 10 (1) (1974) 186–189.

21. **Belenkij S. Z., Landau L. D.,** Hydrodynamic theory of multiple production of particles, Nuovo Cim. 3 (Suppl. 1) (1956) 15–31.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛАРИОНОВА Дарья Максимовна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

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

dlar@bk.ru

ORCID: 0009-0007-7019-5586

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

КОТОВ Дмитрий Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

НЕУМИН Дмитрий Власович – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
neumin.dv@mail.ru

THE AUTHORS

LARIONOVA Daria M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dlar@bk.ru
ORCID: 0009-0007-7019-5586

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

KOTOV Dmitry O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

NEUMIN Dmitry V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
neumin.dv@mail.ru

Статья поступила в редакцию 20.04.2026. Одобрена после рецензирования 19.05.2026. Принята 19.05.2026.
Received 20.04.2026. Approved after reviewing 19.05.2026. Accepted 19.05.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 539.12
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19313

ДВОЙНАЯ ПРОДОЛЬНАЯ СПИНОВАЯ АСИММЕТРИЯ ЛЕГКИХ ПСЕВДОСКАЛЯРНЫХ МЕЗОНОВ, РОЖДЕННЫХ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРОДОЛЬНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ПРОТОНОВ

Д. В. Круашвили ✉, Я. А. Бердников
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

Аннотация. В работе проанализирована (методом моделирования Монте-Карло) величина двойной продольной спиновой асимметрии π-, *K*- и η-мезонов, рожденных в столкновениях продольно-поляризованных протонов при энергиях 510, 200 и 27 ГэВ. Моделирование проведено с использованием программного пакета Pythia8, предварительно модифицированного для поставленной задачи: учета спиральных функций распределения партонов и сечений взаимодействия поляризованных партонов с определенными спиральностями. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными для значений энергии 510 и 200 ГэВ из литературных источников показало их неплохое соответствие. Это послужило основанием для расчетного прогнозирования результатов планируемого эксперимента NICA для рассмотренных мезонов при энергии 27 ГэВ.

Ключевые слова: Pythia8, двойная продольная спиновая асимметрия, функция распределения, партонное сечение рассеяния

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Круашвили Д. В., Бердников Я. А. Двойная продольная спиновая асимметрия легких псевдоскалярных мезонов, рожденных в столкновениях продольно-поляризованных протонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 162–170. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.19313

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19313

THE DOUBLE LONGITUDINAL SPIN ASYMMETRY OF LIGHT PSEUDOSCALAR MESONS PRODUCED IN COLLISIONS OF LONGITUDINALLY POLARIZED PROTONS

D. V. Kruashvili ✉, Ya. A. Berdnikov
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

Abstract. The magnitude of the double longitudinal spin asymmetry of π-, *K*-, and η-mesons generated in collisions of longitudinally polarized protons at energies of 510, 200, and 27 GeV has been analyzed (using Monte Carlo simulation). The simulation was carried out using the Pythia8 software package, which had been previously modified for the task at hand: accounting for spiral parton distribution functions and interaction cross-sections of polarized partons with certain spiralities. A comparison of the simulation results with experimental data for energy values of 510 and 200 GeV from literature sources showed a good agreement. This

© Круашвили Д. В., Бердников Я. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

served as the basis for calculating the results of the planned NICA experiment for the considered mesons at an energy of 27 GeV.

Keywords: Pythia8, double longitudinal spin asymmetry, distribution function, parton cross section

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A., The double longitudinal spin asymmetry of light pseudoscalar mesons produced in collisions of longitudinally polarized protons, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 162–170. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19313

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

Введение

В настоящее время проводится много экспериментов по изучению рождения мезонов в столкновениях продольно-поляризованных протонов [1 – 6]. Особый интерес представляет проблема, связанная с неодинаковой вероятностью рождения мезонов в столкновениях протонов, обладающих одинаковой и разной спиральностями. Физической величиной, характеризующей различие выходов частиц в столкновениях таких протонов, служит двойная продольная спиновая асимметрия (ДПСА), которая определяется следующим выражением [7]:

$$A_{LL} = \frac{d\sigma^{(++)} - d\sigma^{(+-)}}{d\sigma^{(++)} + d\sigma^{(+-)}}. \quad (1)$$

В числителе формулы (1) стоит разность инклюзивных сечений рождения мезона в столкновении протонов с одинаковой ($d\sigma^{(++)}$) и разной ($d\sigma^{(+-)}$) спиральностями. Величина ДПСА нормируется на сумму инклюзивных сечений (с точностью до множителя 2 [8]), что представляет собой усредненное по спиральностям сечение – неполяризованное сечение $d\sigma$:

$$d\sigma = \frac{1}{4}\left(d\sigma^{(++)} + d\sigma^{(+-)} + d\sigma^{(--)} + d\sigma^{(-+)}\right) = \frac{1}{2}\left(d\sigma^{(++)} + d\sigma^{(+-)}\right). \quad (2)$$

Согласно теореме факторизации [8], разность сечений $d\sigma^{(++)} - d\sigma^{(+-)}$ можно представить в виде свертки Δf спиральных функций распределения партонов a и b (Δf_a и Δf_b) в сталкивающихся протонах, функции D_c^M – фрагментации партона с в мезон M и поляризованного сечения партонного подпроцесса $d\Delta\sigma^{ab\to cd}$, которое представляет собой разность сечений столкновения партонов с одинаковой и разной спиральностями: $d\sigma^{ab(++)\to cd} - d\sigma^{ab(+-)\to cd}$:

$$2(d\sigma^{(++)} - d\sigma^{(+-)}) = \sum_{a,b,c,d} \Delta f_a \otimes \Delta f_b \otimes D_c^M \otimes d\Delta\sigma^{ab\to cd}.$$

Суммирование проводится по всем типам партонов в протоне: по валентным и морским кваркам, а также по глюонам.

Таким образом ДПСА принимает следующий вид:

$$A_{LL} = \frac{\sum_{a,b,c,d} \Delta f_a \otimes \Delta f_b \otimes D_c^M \otimes d\Delta\sigma^{ab\to cd}}{d\sigma}.$$

Из полученного выражения следует, что ДПСА позволяет изучать спиральные функции распределения партонов в протоне. Данные функции распределения позволяют определять вклад кварков и глюонов в спин протона. В одном из современных подходов [9], принято считать, что спин протона формируется из спинов морских и валентных кварков $\Delta\Sigma$, глюонов ΔG и орбитальных моментов кварков и глюонов L_q, L_g:

$$S_p = 1/2 = (1/2)\,\Delta\Sigma + \Delta G + L_q + L_g.$$

© Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

При этом спины кварков и глюонов выражаются через интегрирование спиральных функций распределения [7]:

$$\Delta\Sigma = \sum_q \int \Delta f_q(x,Q^2)dx,\ \Delta G = \int \Delta g(x,Q^2)dx.$$

Таким образом, исследование двойной продольной спиновой асимметрии позволит внести ясность в ныне актуальную проблему спина протона.

Цели данной работы – разработать программу, которая бы позволяла использовать функции распределения партонов с определенной спиральностью, а также сечения жесткого партонного подпроцесса партонов (также с определенной спиральностью), далее с помощью программы выполнить моделирование требуемого столкновения протонов, а в случае соответствия полученных результатов экспериментальным данным осуществить прогнозирование для условий планируемого эксперимента NICA.

Для достижения поставленной цели был выбран модифицированный нами программный пакет Pythia8. Кроме того, были поставлены следующие задачи:

смоделировать столкновения протонов с одинаковой и разной спиральностями при энергиях 510 и 200 ГэВ для расчета ДПСА π^+-, π^--, π^0-, K^+-, K^-- и η-мезонов;

провести сравнение полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными;

на этой основе предсказать возможную величину ДПСА π^+-, π^--, π^0-, K^+-, K^-- и η-мезонов при энергии 27 ГэВ.

Методика исследования

Для вычисления двойной продольной спиновой асимметрии необходимо определить, в соответствии с формулой (1), инклюзивные сечения рождения мезона $d\sigma^{(++)}$ и $d\sigma^{(+-)}$ в столкновении протонов. Указанные сечения можно представить в следующем виде [10]:

$$\begin{aligned} d\sigma^{(++)} = {} & f_{a+}^{+} \otimes f_{b+}^{+} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(++)\to cd} + f_{a+}^{+} \otimes f_{b-}^{+} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(+-)\to cd} + \\ & + f_{a-}^{+} \otimes f_{b+}^{+} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(-+)\to cd} + f_{a-}^{+} \otimes f_{b-}^{+} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(--)\to cd}; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} d\sigma^{(+-)} = {} & f_{a+}^{+} \otimes f_{b+}^{-} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(++)\to cd} + f_{a+}^{+} \otimes f_{b-}^{-} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(+-)\to cd} + \\ & + f_{a-}^{+} \otimes f_{b+}^{-} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(-+)\to cd} + f_{a-}^{+} \otimes f_{b-}^{-} \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab(--)\to cd}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $f_{a\xi}^{\varepsilon}$ – функция распределения партона a (b) со спиральностью ξ в протоне со спиральностью ε; $d\sigma^{ab(\xi_1\xi_2)\to cd}$ – сечение жесткого подпроцесса рассеяния партонов a, b со спиральностями ξ_1, ξ_2.

Спиральные функции распределения тогда выражаются следующим образом [10]:

$$\Delta f_{a(b)} = f_{a(b)+}^{+} - f_{a(b)-}^{+} = f_{a(b)-}^{-} - f_{a(b)+}^{-}. \quad (4)$$

В то же время неполяризованные функции распределения – функции распределения партонов в протоне, не учитывающие спиральность партона, представляются в виде [10]:

$$f_{a(b)} = f_{a(b)+}^{+} + f_{a(b)-}^{+} = f_{a(b)-}^{-} + f_{a(b)+}^{-}. \quad (5)$$

В исходном виде генератора Монте-Карло программный пакет Pythia8 при генерации протон-протонных столкновений осуществляет свертку неполяризованных функций распределения, а также функции фрагментации и неполяризованного партонного сечения [11]:

$$d\sigma = f_a \otimes f_b \otimes D_c^M \otimes d\sigma^{ab\to cd},$$

где $d\sigma^{ab\to cd} = \frac{1}{4}\sum_{\xi_1\xi_2} d\sigma^{ab(\xi_1\xi_2)\to cd}$.

Спиральность партонов в исходном коде пакетом Pythia8 не учитывается. Таким образом, для генерации протон-протонных столкновений с сечениями $d\sigma^{(++)}$ и $d\sigma^{(+-)}$ пакет

Pythia8 необходимо модифицировать; для этого следует добавить новый параметр: спиральность партонов жесткого рассеяния. Кроме того, надлежит добавить сечения жесткого рассеяния партонов с заданными спиральностями и соответствующие функции распределения партонов с этими спиральностями. Для вычисления величин $d\sigma^{(++)}$ и $d\sigma^{(+-)}$ необходимо проделать по 4 запуска модифицированного генератора, в каждом из которых в пакете Pythia8 задается жесткий процесс, соответствующий одному из слагаемых формул (7) и (8).

В нашей работе были учтены следующие партонные процессы:

$$gg \to gg,\ gg \to q\bar{q},\ q\bar{q} \to gg,\ qq \to qq,\ qg \to qg.$$

Сечения $d\sigma/dt$, учитывающие спиральности начальных частиц для этих процессов [10], имеют следующий вид:

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(q_\alpha q_\beta \to q_\alpha q_\beta\right) = \frac{8}{9}\left[\frac{s^2}{t^2} + \delta_{\alpha\beta}\left(\frac{s^2}{u^2} - \frac{2}{3}\frac{s^2}{tu}\right)\right];$$

$$\frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(q_\alpha q_\beta \to q_\alpha q_\beta\right) = \frac{8}{9}\left[\frac{u^2}{t^2} + \delta_{\alpha\beta}\frac{t^2}{u^2}\right];$$

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(q_\alpha \bar{q}_\beta \to q_\mu \bar{q}_\lambda\right) = \frac{8}{9}\left[\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\lambda}\frac{s^2}{t^2}\right];$$

$$\frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(q_\alpha \bar{q}_\beta \to q_\mu \bar{q}_\lambda\right) = \frac{8}{9}\left(\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\lambda}\frac{u^2}{t^2} + \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\lambda}\frac{t^2+u^2}{s^2} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\lambda}\frac{u^2}{st}\right);$$

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(qg \to qg\right) = \frac{2s^2}{t^2} - \frac{8}{9}\frac{s^2}{us};\ \frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(qg \to qg\right) = \frac{2u^2}{t^2} - \frac{8}{9}\frac{u^2}{us};$$

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(\bar{q}g \to \bar{q}g\right) = \frac{2s^2}{t^2} - \frac{8}{9}\frac{s^2}{us};\ \frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(\bar{q}g \to \bar{q}g\right) = \frac{2u^2}{t^2} - \frac{8}{9}\frac{u^2}{us};$$

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(gg \to q\bar{q}\right) = 0;$$

$$\frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(gg \to q\bar{q}\right) = \frac{1}{3}\frac{u^2+t^2}{ut} - \frac{3}{4}\frac{t^2+u^2}{s^2};\ \frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(q\bar{q} \to gg\right) = 0;$$

$$\frac{d\sigma^{+-}}{dt}(q\bar{q} \to gg) = \frac{64}{27}\frac{t^2+u^2}{ut} - \frac{16}{3}\frac{t^2+u^2}{s^2};$$

$$\frac{d\sigma^{++}}{dt}\left(gg \to gg\right) = \frac{9}{2}\left(\frac{2s^2}{ut} - \frac{su}{t^2} - \frac{st}{u^2}\right);$$

$$\frac{d\sigma^{+-}}{dt}\left(gg \to gg\right) = \frac{9}{2}\left(6 - \frac{2s^2}{ut} - \frac{su}{t^2} - \frac{st}{u^2} - \frac{2ut}{s^2}\right).$$

Функции распределения партонов с определенными спиральностями были получены из системы уравнений (9), (10), при этом в качестве спиральных функций распределения были взяты наборы партонных функций: NNPDFpol11_100, а в качестве неполяризованных функций – распределения NNPDF31_nnlo_as_0118 из библиотеки LHAPDF [12].

В программе, запускающей модифицированный вариант программы Pythia8, задается спиральность ξ партонов a и b, подключаются соответствующие функции распределения $f_{a\xi}^{\varepsilon_1}, f_{b\xi}^{\varepsilon_2}$ для генерации столкновений протонов со спиральностями ε_1, ε_2 и отбираются мезоны, которые образовались в процессе фрагментации партонов c или $\bar{d}$, образовавшихся в результате жесткого процесса $ab \to cd$. Далее находятся инвариантные спектры [13]:

$$E\frac{d^3\sigma^{++}}{dp^3}=\frac{1}{2\pi p_T}\frac{d^2N^{++}}{dp_T dy}\frac{\sigma^{++}{}_{tot}}{N_{events}};\ E\frac{d^3\sigma^{+-}}{dp^3}=\frac{1}{2\pi p_T}\frac{d^2N^{+-}}{dp_T dy}\frac{\sigma^{+-}{}_{tot}}{N_{events}},$$

где p_T – поперечный импульс мезона; N^{++}, N^{+-} – число рожденных мезонов в столкновениях протонов со спиральностями (++) и (+−), соответственно; y – быстрота мезона; σ_{tot} – полное сечение; N_{ev} – число сгенерированных событий.

Таким образом, выражение для двойной продольной спиновой асимметрии (ДПСА) принимает следующий вид:

$$A_{LL}=\frac{E\frac{d^3\sigma^{++}}{dp^3}-E\frac{d^3\sigma^{+-}}{dp^3}}{E\frac{d^3\sigma^{++}}{dp^3}+E\frac{d^3\sigma^{+-}}{dp^3}}.$$

Результаты расчетов и их обсуждение

На рис. 1 – 3 представлена рассчитанная нами величина ДПСА в зависимости от значений поперечного импульса для π^+-, π^--, π^0-, K^+-, K^-- и η-мезонов, рожденных в столкновениях продольно-поляризованных протонов при энергиях 510, 200 и 27 ГэВ, соответственно. Приводится также сравнение результатов расчета ДПСА с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

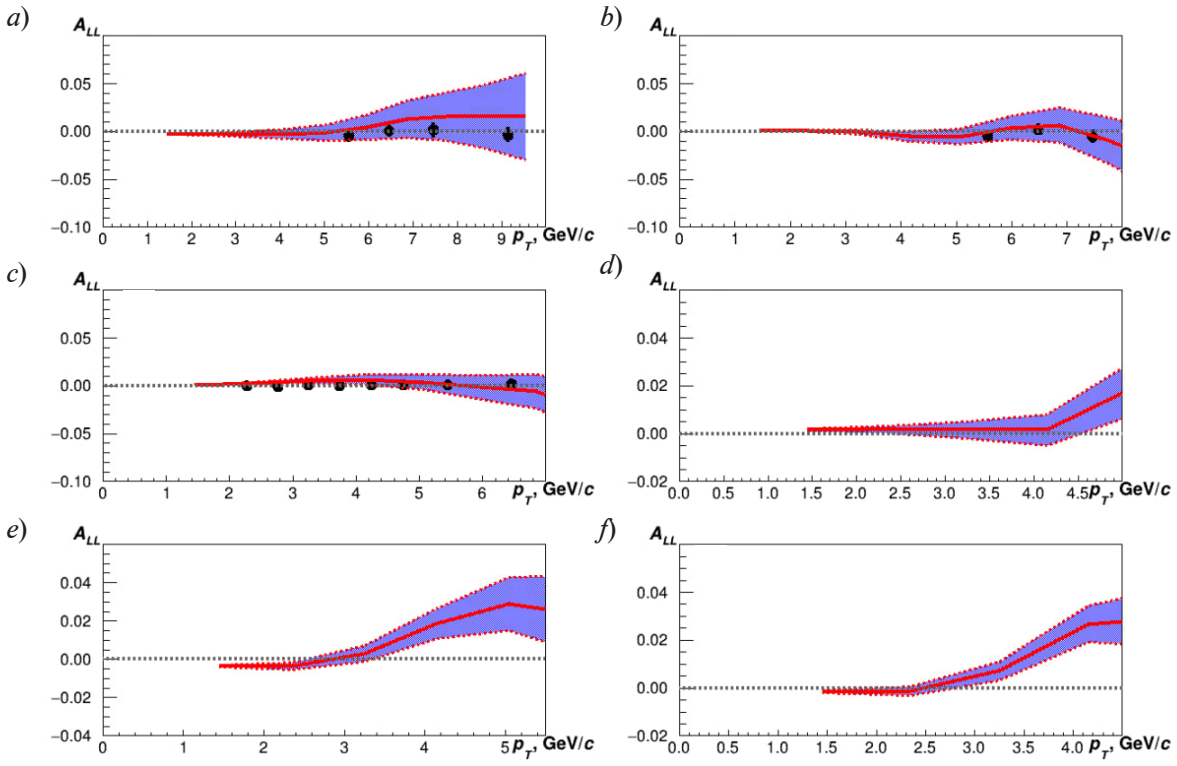


Рис. 1. Расчетные зависимости величины ДПСА от значений поперечного импульса для 6 типов мезонов при энергии 510 ГэВ в сравнении с экспериментальными данными работ [2, 3]. Типы мезонов: π^-(*a*), π^+(*b*), π^0(*c*), K^+(*d*), K^-(*e*) и η (*f*). Экспериментальные данные из статей [3] (*a*, *b*), [2] (*c*) показаны черными точками

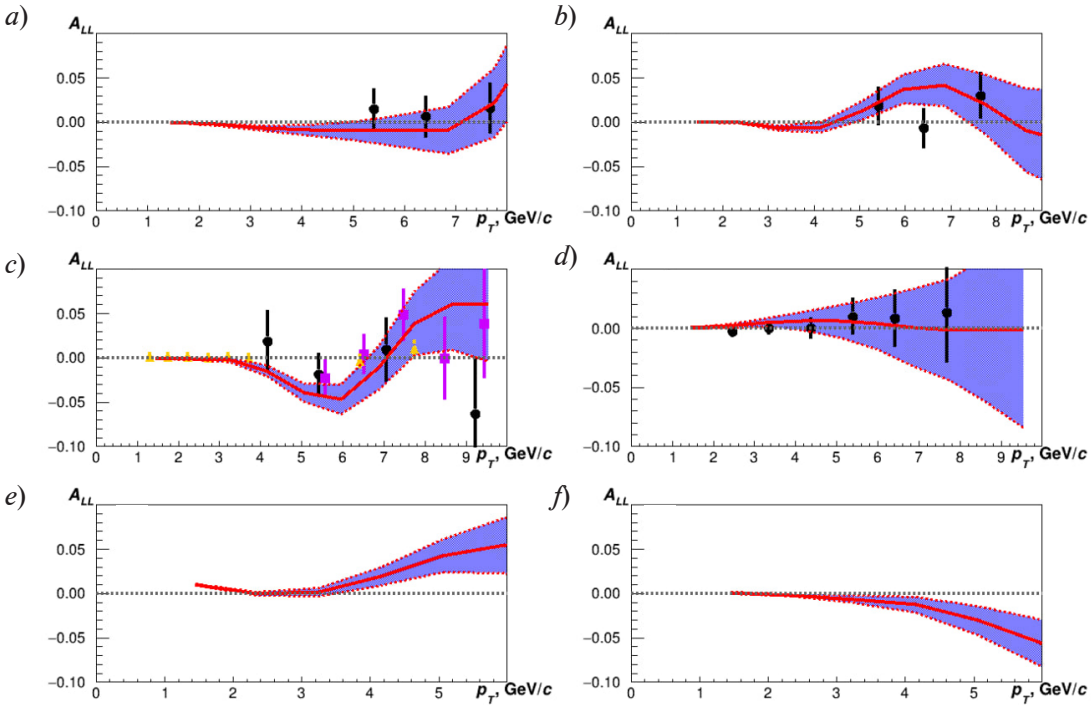


Рис. 2. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 1, для тех же 6 типов мезонов, но при энергии 200 ГэВ и в сравнении с экспериментальными данными работ [4] (*a*, *b*), [1] (*c*), [5] (*d*) – черные точки; [5] (*c*) – оранжевые, [6] (*c*) – фиолетовые точки

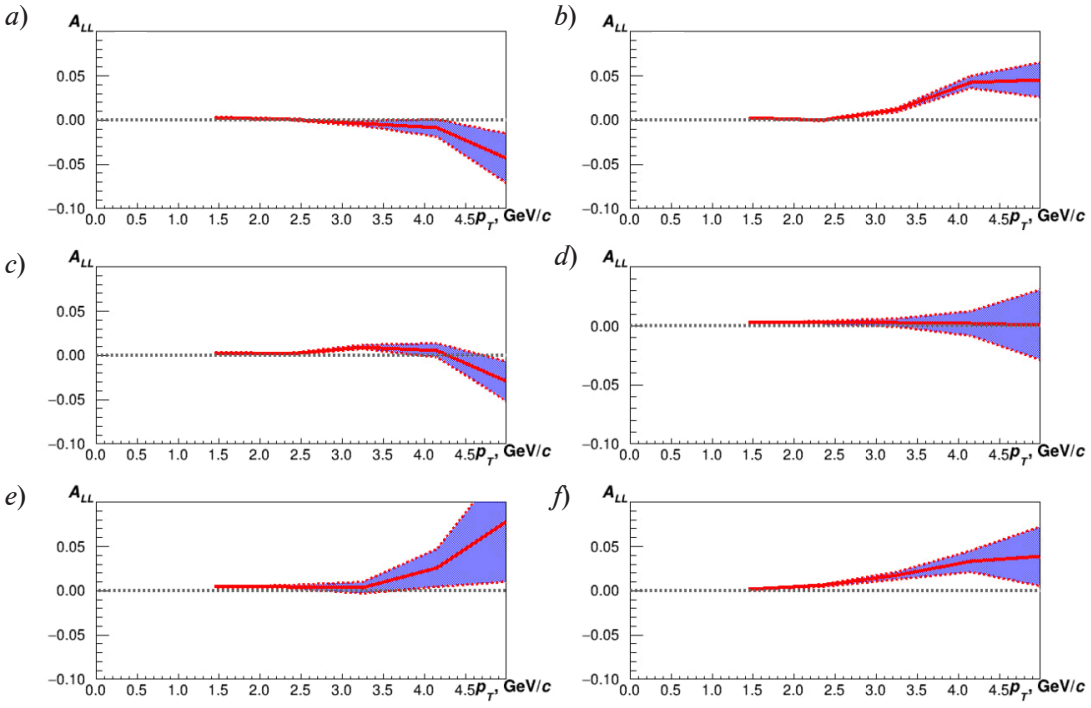


Рис. 3. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 1, 2, для тех же 6 типов мезонов, но при энергии 27 ГэВ (без сравнения с экспериментальными данными)

Анализ представленных результатов позволяет заключить, что величина ДПСА может быть как положительной, так и отрицательной, причем в зависимости от диапазона значений поперечного импульса. Отрицательная величина обусловлена разницей в характере столкновения протонов: при одних и тех же значениях поперечного импульса в столкновении протонов с одинаковыми спиральностями рождается меньше мезонов, чем в столкновении протонов с разными спиральностями.

Заключение

В работе была рассмотрена возможность вычисления двойной продольной спиновой асимметрии (ДПСА) легких псевдоскалярных мезонов с помощью программного пакета Pythia8 с некоторой модификацией части исходного кода Pythia8. Такая модификация позволила рассчитывать величину ДПСА в протон-протонных столкновениях при разных значениях энергии. Проведено сравнение полученных расчетных результатов с экспериментальными данными, представленными в литературе, и показано вполне удовлетворительное их согласие при значениях энергии 510 и 200 ГэВ.

Полученное соответствие послужило основанием для расчетного прогнозирования результатов планируемого эксперимента NICA (см. рис. 3) при энергии 27 ГэВ. Модификация использованного программного пакета открывает новые возможности для дальнейших важных прогнозов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Abelev B., Aggarwal M., Ahammed Z., et al.** (STAR Collaboration). Longitudinal double-spin asymmetry and cross section for inclusive neutral pion production at midrapidity in polarized proton collisions at s = 200 GeV // Physical Review D. 2009. Vol. 80. No. 11. P. 111108.

2. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration). Inclusive cross section and double-helicity asymmetry for π^0 production at midrapidity in $p + p$ collisions at s = 510 GeV // Physical Review D. 2016. Vol. 93. No. 1. P. 011501.

3. **Acharya U., Adare A., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Measurement of charged pion double spin asymmetries at midrapidity in longitudinally polarized $p + p$ collisions at s = 510 GeV // Physical Review D. 2020. Vol. 102. No. 3. P. 032001.

4. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration). Charged-pion cross sections and double-helicity asymmetries in polarized $p + p$ collisions at s = 200 GeV // Physical Review D. 2015. Vol. 91. No. 3. P. 032001.

5. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration). Inclusive double-helicity asymmetries in neutral-pion and eta-meson production in $p + p$ collisions at s = 200 GeV // Physical Review D. 2014. Vol. 90. No. 1. P. 012007.

6. **Adamczyk L., Adkins J., Agakishiev G., et al.** (STAR Collaboration). Neutral pion cross section and spin asymmetries at inter-mediate pseudorapidity in polarized proton collisions at s = 200 GeV // Physical Review D. 2014. Vol. 89. No. 1. P. 012001.

7. **Салеев В. А., Шипилова А. В.** Двойные продольные спиновые асимметрии в прямом рождении фотонов на коллайдере NICA // Письма в журнал «Физика элементарных частиц и атомного ядра». 2023. Т. 20. № 3 (248). С. 417–421.

8. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Cross section and double helicity asymmetry for η mesons and their comparison to π^0 production in $p + p$ collisions at s = 200 GeV // Physical Review D. 2011. Vol. 83. No. 3. P. 032001.

9. **Jaffe R. L., Manohar A.** The g1 problem: Deep inelastic electron scattering and the spin of the proton // Nuclear Physics B. 1990. Vol. 337. No. 3. Pp. 509–546.

10. **Babcock J., Monsay E., Sivers D.** Quantum-chromodynamic predictions for inclusive spin-spin asymmetries at large transverse momentum // Physical Review D. 1979. Vol. 19. No. 5. P. 1483.

11. **Ciesielski R., Goulianos K.** MBR Monte Carlo simulation in PYTHIA8 // arXiv preprint arXiv:1205.1446. 2012.

12. **Buckley A., Ferrando J., Lloyd S., Nordström K., Page B., Rüfenacht M., Schönherr M., Watt G.** LHAPDF6: parton density access in the LHC precision era // European Physics Journal C. 2015. Vol. 75. No. 3. P. 132.

13. **Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). High transverse momentum η meson production in $p + p$, d + Au, and Au + Au collisions at s_{NN} = 200 GeV // Physical Review C. 2007. Vol. 75. No. 2. P. 024909.

REFERENCES

1. **Abelev B., Aggarwal M., Ahammed Z., et al.** (STAR Collaboration), Longitudinal double-spin asymmetry and cross section for inclusive neutral pion production at midrapidity in polarized proton collisions at s = 200 GeV, Phys. Rev. D. 80 (11) (2009) 111108.

2. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** ((PHENIX Collaboration), Inclusive cross section and double-helicity asymmetry for π^0 production at midrapidity in $p + p$ collisions at s = 510 GeV, Phys. Rev. D. 93 (1) (2016) 011501.

3. **Acharya U., Adare A., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Measurement of charged pion double spin asymmetries at midrapidity in longitudinally polarized $p + p$ collisions at s = 510 GeV, Phys. Rev. D. 102 (3) (2020) 032001.

4. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration), Charged-pion cross sections and double-helicity asymmetries in polarized $p + p$ collisions at s = 200 GeV, Phys. Rev. D. 91 (3) (2015) 032001.

5. **Adare A., Aidala C., Ajitanand N. N., et al.** (PHENIX Collaboration), Inclusive double-helicity asymmetries in neutral-pion and eta-meson production in $p + p$ collisions at s = 200 GeV, Phys. Rev. D. 90 (1) (2014) 012007.

6. **Adamczyk L., Adkins J., Agakishiev G., et al.** (STAR Collaboration), Neutral pion cross section and spin asymmetries at intermediate pseudorapidity in polarized proton collisions at s = 200 GeV, Phys. Rev. D. 89 (1) (2014) 012001.

7. **Saleev V. A., Shipilova A. V.,** Double longitudinal-spin asymmetries in direct photon production at NICA, Phys. Part. Nuclei. Lett. 20 (3) (2023) 400–403.

8. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Cross section and double helicity asymmetry for η mesons and their comparison to π^0 production in $p + p$ collisions at s = 200 GeV, Phys. Rev. D. 83 (3) (2011) 032001.

9. **Jaffe R. L., Manohar A.,** The g1 problem: Deep inelastic electron scattering and the spin of the proton, Nucl. Phys. B. 337 (3) (1990) 509–546.

10. **Babcock J., Monsay E., Sivers D.,** Quantum-chromodynamic predictions for inclusive spin-spin asymmetries at large transverse momentum, Phys. Rev. D. 19 (5) (1979) 1483.

11. **Ciesielski R., Goulianos K.,** MBR Monte Carlo simulation in PYTHIA8, arXiv preprint arXiv:1205.1446 (2012).

12. **Buckley A., Ferrando J., Lloyd S., et al.,** LHAPDF6: parton density access in the LHC precision era, Eur. Phys. J. C. 75 (3) (2015) 132.

13. **Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), High transverse momentum η meson production in $p + p$, d + Au, and Au + Au collisions at s_NN = 200 GeV, Phys. Rev. C. 75 (2) (2007) 024909.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КРУАШВИЛИ Дмитрий Васильевич – *инженер Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

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

kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

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

yberdnikov1947@gmail.com

ORCID: 0000-0003-0309-5917

THE AUTHORS

KRUASHVILI Dmitry V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
yberdnikov1947@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0309-5917

Статья поступила в редакцию 21.04.2026. Одобрена после рецензирования 19.05.2026. Принята 19.05.2026.
Received 21.04.2026. Approved after reviewing 19.05.2026. Accepted 19.05.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Радиофизика

Научная статья
УДК 535.3, 535-15, 535.417
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19314

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧИРПИРОВАННОЙ ВОЛОКОННОЙ БРЭГГОВСКОЙ РЕШЕТКИ В МАЛОМОДОВОМ СТУПЕНЧАТОМ СВЕТОВОДЕ ПРИ ОСЕСИММЕТРИЧНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

А. А. Маркварт ✉, Л. Д. Завалишина, Л. Б. Лиокумович, Н. А. Ушаков
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ aleksandr-markvart@yandex.ru

Аннотация. В работе предложен вариант многомодовой волоконной решетки Брэгга, записанной в маломодовое ступенчатое оптоволокно и работающей в двухмодовом режиме LP_{01}-LP_{02}. В качестве оптического волокна, наиболее отвечающего требованиям, подобрано коммерчески доступное волокно FG025LJA компании Thorlabs с диаметром сердцевины 25 мкм и числовой апертурой 0,1, которое в *O*-диапазоне длин волн имеет только две осесимметричные моды. Рассчитаны коэффициенты прямых и перекрестных связей мод в решетке, а затем спектры отражения однородных и чирпированных вариантов решетки. Продемонстрированы эффекты насыщения, уширения и интерференции резонансов, а также получение единого пика отражения с максимальным коэффициентом отражения до 98%.

Ключевые слова: многомодовая решетка Брэгга, чирпированная решетка, маломодовое оптическое волокно, осесимметричная мода

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 25-79-00365).

Для цитирования: Маркварт А. А., Завалишина Л. Д., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. Моделирование чирпированной волоконной брэгговской решетки в маломодовом ступенчатом световоде при осесимметричном возбуждении // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 171–182. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19314

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19314

SIMULATION OF A CHIRPED FIBER BRAGG GRATING IN A FEW-MODE STEP-INDEX OPTICAL FIBER UNDER AXISYMMETRIC EXCITATION

A. A. Markvart ✉, L. D. Zavalishina, L. B. Liokumovich, N. A. Ushakov
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ aleksandr-markvart@yandex.ru

Abstract. In this paper, a multimode fiber Bragg grating variant inscribed in a few-mode step-index fiber and operating in dual-mode LP_{01}-LP_{02} regime has been proposed. The commercially available Thorlabs FG025LJA fiber with a 25-μm core diameter and a numerical aperture of 0.1, as a suitable optical fiber was selected (this fiber exhibits only two axisymmetric modes in the *O*-band). The self-coupling and cross-coupling coefficients of the modes in the grating and the reflectance spectra of homogeneous and chirped gratings were calculated.

© Маркварт А. А., Завалишина Л. Д., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

The effects of saturation, broadening, and resonance interference, as well as the generation of a single reflection peak with a maximum reflectivity of up to 98% were demonstrated.

Keywords: multimode Bragg grating, chirped grating, few-mode fiber, axisymmetric mode

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 25-79-00365).

For citation: Markvart A. A., Zavalishina L.D., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., Simulation of a chirped fiber Bragg grating in a few-mode step-index optical fiber under axisymmetric excitation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 171–182. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19314

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

Введение

Датчики на основе волоконных брэгговских решеток (ВБР) привлекательны для широкого спектра применений благодаря таким преимуществам, как малый вес, компактность, электромагнитная совместимость, электро- и взрывобезопасность, биосовместимость, пригодность для работы в жестких условиях, а также возможность создания сенсорных сетей [1, 2]. Как правило, брэгговские решетки записываются в одномодовые волокна. Такие решетки получили широкое распространение ввиду наличия отработанных методов изготовления, простоте алгоритмов обработки сигналов и широких возможностей для мультиплексирования. Однако в ряде отдельных применений перспективно использование брэгговских решеток, записанных в многомодовое волокно (МВБР) [3]. Так, на основе лишь одной решетки можно реализовать многопараметрические измерения благодаря существованию дополнительных степеней свободы в многомодовом волокне [4]. Последнее хорошо сопрягается с недорогими источниками излучения, например обычными светодиодами, в отличие от одномодового волокна, для которого требуется лазер или суперлюминисцентный диод. Это позволяет изготавливать низкобюджетные сенсорные системы на основе МВБР [5]. Полимерные многомодовые волокна служат основой для датчиков с улучшенной чувствительностью к растяжению [6], а сапфировые и беспримесные кварцевые многомодовые волокна – для высокотемпературных датчиков [7]. Кроме того, на основе МВБР можно реализовывать преобразователи модового состава, полезные при построении лазеров и линий связи [8]. Однако спектр отражения МВБР имеет достаточно сложный характер. Каждая распространяющаяся мода вносит свой резонансный вклад при взаимодействии с самой собой и при перекрестном взаимодействии с другими модами [3]. Кроме того, в существенно многомодовых и в чирпированных решетках эти резонансы начинают пересекаться, и в спектре отражения появляются интерференционные составляющие [9 – 11]. Как правило, эти составляющие считаются паразитными, и с ними приходится бороться самыми разными методами [11].

Исследование МВБР и последующее управление спектрами отражения в однородных и неоднородных МВБР является актуальной задачей при проектировании новых компонентов для многомодовых волоконно-оптических систем с использованием МВБР. При этом целесообразно начинать те или иные исследования с МВБР в двухмодовом режиме как с теоретической, так и практической точек зрения, ввиду относительной простоты спектра отражения, по сравнению с существенно многомодовыми решетками. Более того, МВБР именно в маломодовых волокнах могут объединять преимущества многомодовых МВБР с одной стороны и сохранять относительную простоту с другой. Но на данный момент имеется лишь небольшое количество соответствующих исследований. В работе [9] рассматривается двухмодовый режим LP_{01}-LP_{11} в чирпированной решетке, записанной в волокно с большой площадью моды, диаметром сердцевины 20 мкм и апертурой 0,06 от компании Nufern (США). При этом возбуждение LP_{11} моды реализуется за счет изгиба. В работе [10] также рассматривается двухмодовый режим LP_{01}-LP_{11} в чирпированной решетке, но записанной в градиентное двухмодовое волокно фирмы OFS (США).

© Markvart A. A., Zavalishina L. D., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Цель настоящей работы – демонстрация эффектов насыщения, интерференции уширения резонансов, а также формирования единого резонансного пика в маломодовой МВБР в оптоволокне со ступенчатым профилем показателя преломления.

Нами предлагается вариант МВБР, записанной в простое многомодовое ступенчатое волокно и работающей в двухмодовом режиме LP_{01}-LP_{02}. Такой режим реализуется при осесимметричной сварке подводящего одномодового волокна со ступенчатым маломодовым волокном, обладающим достаточно малой сердцевиной и низким значением числовой апертуры при записи решетки, однородной в поперечном сечении.

В качестве оптического волокна, наиболее отвечающего нашим требованиям, подобрано коммерчески доступное волокно FG025LJA компании Thorlabs [12] с диаметром сердцевины 25 мкм и числовой апертурой 0,1, которое в *O*-диапазоне длин волн имеет только две осесиммметричные моды.

В работе также рассчитаны коэффициенты прямых и перекрестных связей мод в решетке и выполнены последующие расчеты спектров отражения однородных и чирпированных вариантов решетки; продемонстрированы эффекты насыщения, уширения и интерференции резонансов, а также показано получение единого пика отражения с максимальным коэффициентом.

Исходные теоретические выражения для расчета многомодовых брэгговских решеток

Распределение показателя преломления волоконной брэгговской решетки, записанной в сердцевину оптического волокна, имеет вид

$$n(r,\varphi,z) = n_0(r,\varphi) + \delta n(r,\varphi,z), \tag{1}$$

где $n_0(r, \varphi)$ – профиль показателя преломления сердцевины оптического волокна, $\delta n(r, \varphi, z)$ – периодическое изменение показателя преломления решетки вдоль волокна (вдоль оси z).

Функция $\delta n(r, \varphi, z)$, в общем случае решеток, неоднородных вдоль оси волокна, имеет вид

$$\delta n(r,\varphi,z) = \overline{\delta n(r,\varphi)}\, g(z)\left\{1 + \nu\cos\left[\frac{2\pi}{\Lambda_0}z + \phi(z)\right]\right\}, \tag{2}$$

где $\overline{\delta n(r,\varphi)}$ – среднее значение модуляции показателя преломления решетки (без аподизации); $g(z)$ – функция аподизации; ν, Λ_0 – контраст решетки и ее период; $\phi(z)$ – дополнительная фаза, описывающая чирп решетки.

Зависимость среднего значения $\delta n(r,\varphi)$ от координат r и φ отражает возможную неоднородность решетки в поперечном сечении сердцевины волокна; произведение $\nu\,\delta n(r,\varphi)$ фактически является амплитудой модуляции решетки (без учета аподизации).

На практике чирп вводится линейным законом изменения локального периода решетки, который для решетки, центрованной относительно начала координат $z = 0$, имеет следующий вид:

$$\Lambda(z) = \Lambda_0 + Cz, \tag{3}$$

где C – параметр чирпа.

Для линейного чирпа выражение для фазы имеет вид

$$\phi(z) = \frac{2\pi}{C}\ln\left(1 + \frac{C}{\Lambda_0}z\right) - \frac{2\pi}{\Lambda_0}z. \tag{4}$$

В приближении слабонаправляющего волокна суммарное электрическое поле можно представить через суперпозицию линейно-поляризованных мод LP_{lp}, при этом z-компонентами полей мод можно пренебречь. Для случая МВБР в двухмодовом волокне тангенциальную компоненту вектора суммарного электрического поля $\mathbf{E}_t$ можно представить как суперпозицию двух прямых (падающих) и двух обратных (отраженных) мод:

$$\mathbf{E}_t(x,y,z,t) = \left\{\left[A_1(z)e^{i\beta_1 z} + B_1(z)e^{-i\beta_1 z}\right]\mathbf{e}_{1t}(x,y) + \left[A_2(z)e^{i\beta_2 z} + B_2(z)e^{-i\beta_2 z}\right]\mathbf{e}_{2t}(x,y)\right\}e^{-i\omega t}, \tag{5}$$

где $\mathbf{e}_{it}(r, \varphi)$ – поперечное распределение тангенциальной компоненты вектора электрического поля i-й моды; β_i – ее постоянная распространения; $A_i(z)$ – амплитуда прямой i-й моды; $B_i(z)$ – амплитуда обратной i-й моды; ω – циклическая частота; t – время.

Вместо постоянной распространения моды удобно использовать эффективный показатель преломления моды, который имеет вид

$$n_{eff,i} = \beta_i / k_0, \tag{6}$$

где $k_0 = 2\pi/\lambda$ – волновое число (λ – длина волны в вакууме).

Обычно выбирают такую нормировку полей мод, чтобы мощность, переносимая одной модой, равнялась 1 Вт. В этом случае величина $|A_i|^2$ будет численно равна мощности, переносимой i-й модой. Для LP-мод можно записать такое соответствующее условие:

$$\iint_{\infty} \mathbf{e}_{kt}\mathbf{e}^*_{jt}\, dS = \frac{2\omega\mu_0}{\beta_i}\delta_{kj}, \tag{7}$$

где μ_0 – магнитная постоянная, δ_{ki} – символ Кронекера; звездочка указывает операцию комплексного сопряжения.

В приближении медленно меняющихся амплитуд $A_i(z)$ и $B_i(z)$, с использованием условий фазового синхронизма, таких, что

$$2\beta_i \approx 2\pi/\Lambda + d\phi/dz;\ \beta_1 + \beta_2 \approx 2\pi/\Lambda + d\phi/dz,$$

можно получить стандартный вид системы уравнений связанных мод для брэгговской решетки [10, 13]:

$$\begin{gathered}\frac{dR_1}{dz} = i\hat{\sigma}_1 R_1 + i\kappa_{11}S_1 + i\kappa_{12}S_2,\ \frac{dR_2}{dz} = i\hat{\sigma}_2 R_2 + i\kappa_{21}S_1 + i\kappa_{22}S_2;\\ \frac{dS_1}{dz} = -i\hat{\sigma}_1 S_1 - i\kappa_{11}R_1 - i\kappa^*_{21}R_2,\ \frac{dS_2}{dz} = -i\hat{\sigma}_2 S_2 - i\kappa^*_{12}R_1 - i\kappa_{22}R_2.\end{gathered} \tag{8}$$

Система (8) записана для новых переменных R_i и S_i, которые связаны с амплитудами мод A_i и B_i соотношениями

$$\begin{gathered}R_1(z) = A_1(z)e^{-i\delta_1 z + i\phi/2},\ S_1(z) = B_1(z)e^{i\delta_1 z - i\phi/2},\\ R_2(z) = A_2(z)e^{-i\delta_2 z + i\phi/2},\ S_2(z) = B_2(z)e^{i\delta_2 z - i\phi/2},\end{gathered} \tag{9}$$

где параметр δ_i называется геометрической расстройкой от резонанса Брэгга для i-й моды и следует выражению

$$\delta_i = \beta_i - \frac{\pi}{\Lambda_0}. \tag{10}$$

Такая замена переменных обусловлена исключением осцилляций амплитуд, связанных с расстройками δ_i. Остальные коэффициенты системы (8) определяются соотношениями

$$\hat{\sigma}_i = \delta_i + \sigma_{ii} - \frac{1}{2}\frac{d\phi}{dz}, \tag{11}$$

$$\sigma_{kj} == \frac{\omega\varepsilon_0}{2}\iint_{core} n_0(r,\varphi)\overline{\delta n(r,\varphi)}\, g(z)\mathbf{e}_{kt}\mathbf{e}^*_{jt}\, dS, \tag{12}$$

$$\kappa_{kj} = \frac{\nu}{2}\sigma_{kj}, \tag{13}$$

где $\hat{\sigma}_i$ – эффективная расстройка, σ_{kj} – постоянная составляющая коэффициента связи k-й и j-й мод; κ_{kj} – переменная составляющая коэффициента связи k-й и j-й мод (точнее, амплитуда переменной составляющей коэффициента связи).

В эффективной расстройке учтен сдвиг резонанса из-за чирпа и изменения среднего показателя преломления решетки относительно показателя преломления сердцевины невозмущенного волокна.

Условие $\hat{\sigma}_i = 0$ соответствует брэгговскому резонансу отражения i-й моды саму в себя, а условие $\hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_j = 0$ соответствует перекрестному резонансу отражения k-й моды в j-ю.

Систему уравнений (8) можно записать в матричном виде:

$$\begin{cases} \dfrac{dR}{dz} = i\Delta R + i\mathrm{K}S, \\ \dfrac{dS}{dz} = -i\Delta S - i\mathrm{K}^{\dagger}R, \end{cases} \tag{14}$$

где знак † – операция Эрмитова сопряжения; также введены векторы-столбцы R и S,

$$R = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix},\ S = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}; \tag{15}$$

матрицы Δ и K эффективных расстроек и переменных составляющих коэффициентов связи, соответственно, выражаются как

$$\Delta = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_2 \end{bmatrix},\ \mathrm{K} = \begin{bmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Задача решения системы (14) является двухсторонней краевой задачей. Обычно на входе решетки задаются амплитуды прямых волн $R_{in,\,i} = R_i(-L/2)$, на выходе решетки задается условие отсутствия отраженных волн $S_{out,\,i} = S_i(L/2) = 0$ (L – длина решетки).

Соотношения для коэффициентов связи мод в МВБР, однородной в поперечном сечении, в ступенчатом многомодовом волокне

В данной работе рассматривается брэгговская решетка, записанная в ступенчатое волокно: $n_0(r, \varphi) = n_0$ во всю сердцевину, с однородным поперечным распределением вида $\delta n(r, \varphi) = \delta n$.

При расчетах коэффициентов связи мод часто вводится коэффициент сосредоточения моды в сердцевине Γ_i, отражающий долю мощности i-й моды, сосредоточенной в сердцевине, а также коэффициент η_{kj} перекрытия полей k-й и j-й мод, называемый интегралом перекрытия:

$$\Gamma_i = \frac{\iint_{core} |\mathbf{e}_{it}|^2\, dS}{\iint_{\infty} |\mathbf{e}_{it}|^2\, dS}, \tag{17}$$

$$\eta_{kj} = \frac{\iint_{core} \mathbf{e}_{kt}\mathbf{e}^{*}_{jt}\, dS}{\sqrt{\iint_{\infty} |\mathbf{e}_{kt}|^2\, dS \cdot \iint_{\infty} |\mathbf{e}_{jt}|^2\, dS}}. \tag{18}$$

Далее, с учетом выражений (12), (13), (6) и условия (7), а также соотношения $n_{eff,\,i} \approx n_0$ (справедливо в приближении слабонаправляющего волокна), можно записать следующие выражения для коэффициентов связи мод:

$$\sigma_{ii}(z) = \frac{k_0 n_0\, g(z)\, \overline{\delta n}\, \Gamma_i}{n_{eff,i}} \approx k_0\, g(z)\, \overline{\delta n}\, \Gamma_i, \tag{19}$$

$$\sigma_{kj}(z) = \frac{k_0 n_0\, \overline{\delta n(z)}\, \eta_{kj}}{\sqrt{n_{eff,k} n_{eff,j}}} \approx k_0 g(z) \overline{\delta n}\, \eta_{kj}\ \left(k \neq j\right), \tag{20}$$

$$\kappa_{kj} = \frac{\nu}{2}\sigma_{kj}. \tag{21}$$

Распределения электрических полей LP_{0p} мод в ступенчатом световоде, поляризованных вдоль оси x, описываются функциями Бесселя:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{it} = AJ_0\left(\dfrac{U_i}{a}r\right)\mathbf{x}, \quad r \le a; \\ \mathbf{e}_{it} = A\dfrac{J_0(U_i)}{K_0(W_i)}K_0\left(\dfrac{W_i}{a}r\right)\mathbf{x}, \quad r > a, \end{cases} \tag{22}$$

где a – радиус сердцевины; i – номер моды LP_{0p}; x – единичный вектор; J_0 – функция Бесселя первого рода, нулевого порядка; K_0 – модифицированная функция Бесселя второго рода, нулевого порядка; U_i – поперечное волновое число в сердцевине; W_i – коэффициент затухания в оболочке; A – коэффициент, значение которого зависит от используемой нормировки.

Величины U_i и W_i являются корнями следующего характеристического уравнения:

$$U\frac{J_1(U)}{J_0(U)} = W\frac{K_1(W)}{K_0(W)}, \tag{23}$$

где J_1, K_1 – функции Бесселя 1-го порядка.

Функции J_1, K_1 связаны с эффективным показателем преломления моды и параметрами волокна следующими соотношениями:

$$U_i = ak_o\sqrt{n_0^2 - n_{eff,i}^2},\ W_i = \sqrt{V^2 - U_i^2},\ V = \sqrt{ak_o}\mathrm{NA}, \tag{24}$$

где V – нормированная частота волокна, NA – числовая апертура.

Результаты расчета волоконной брэгговской решетки в двухмодовом режиме

Коммерчески доступное маломодовое волокно Thorlabs FG025LJA, рассматриваемое в данной работе, характеризуется, согласно спецификации [12], следующими параметрами:

Диаметр сердцевины .....25 мкм,
Диаметр оболочки .....125 мкм,
Числовая апертура ..... 0,100 ± 0,015,
Рабочие диапазоны длин волн .... 490 – 550 нм и 700 – 1400 нм.

Следует добавить, что материалами сердцевины и оболочки являются кварц и фторированный кварц, соответственно.

Для исследования был выбран *O*-диапазон длин волн (от 1260 до 1360 нм). В этом диапазоне рассматриваемое оптоволокно имеет две осесимметричные моды: LP_{01} и LP_{02}. С использованием приведенных выше теоретических соотношений, на центральной длине волны 1310 нм были рассчитаны значения эффективных показателей преломления мод, коэффициентов сосредоточения мод в сердцевине и интегралов перекрытия мод:

$$n_{eff,1} = 1{,}44274,\ n_{eff,2} = 1{,}42600,\ \Gamma_1 = 0{,}982,\ \Gamma_2 = 0{,}874,\ \eta_{12} = \eta_{21} = 0{,}046.$$

Для удобства их считали постоянными во всем рассматриваемом диапазоне длин волн. Для наблюдения резонансов в спектре брэгговской решетки был выбран опорный период $\Lambda_0 = 457$ нм. Контраст решетки был задан единичным: $\nu = 1$.

Функция аподизации принималась гауссовой и супергауссовой с настраиваемыми параметрами m и G, согласно выражению

$$g(z) = \exp\left[-\left(\frac{2z}{GL}\right)^{2m}\right]. \tag{25}$$

Далее в расчетах варьировали такие параметры решетки, как ее длина L, амплитуда ее модуляции $\nu\,\delta n = \delta n$, параметр чирпа C.

Значения этих параметров выбирались в следующих диапазонах, обусловленных техническими возможностями записи брэгговских решеток в оптоволокно:

длина – (1 – 150) мм [14] (определяется длиной фазовой маски при классической записи ультрафиолетовым лазером);

амплитуда модуляции – $(0{,}1 - 5{,}0)\cdot 10^{-4}$ для классической записи ультрафиолетовым лазером в оптоволокно с кварцевой сердцевиной, выдержанное в водороде [15];

параметр чирпа – (0 – 30) нм/см.

Расчет МВБР производился стандартным методом расчета чирпированных брэгговских решеток, а именно – методом матриц переноса, который заключается в разбиении решетки на однородные сегменты, для каждого из которых строится матрица передачи $2N \times 2N$ (N – число мод), после чего эти матрицы перемножаются [13, 16, 17].

На первом этапе было проведено моделирование, которое показало, какие характерные спектры отражения для однородных и чирпированных МВБР можно наблюдать при записи решеток в выбранное маломодовое волокно при не самых экстремальных параметрах записи. При этом в расчетах использовалась супергауссова функция аподизации с параметрами $m = 3$, $G = 0{,}5$. Такой выбор обусловлен стремлением создать плоскую вершину спектра отражения чирпированных решеток с одновременным снижением уровня пульсаций. Для амплитуды модуляции δn было выбрано типичное значение: 10^{-4}.

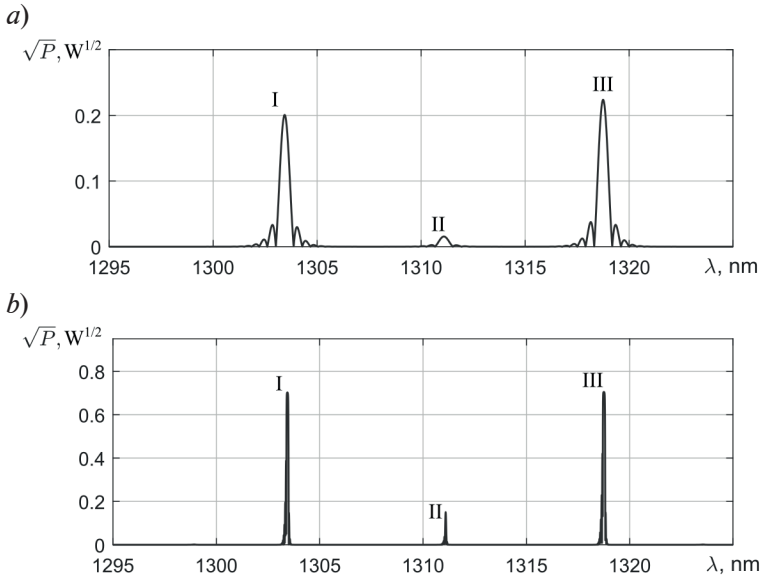


Рис. 1. Спектры мощности отраженного света (зависимости от его длины волны λ величины $\sqrt{P}$ – квадратного корня мощности света, отраженного от МВБР) для двух значений длины однородной решетки L, см: 0,3 (*a*) и 3,0 (*b*).
Мощность падающих мод – 0,5 Вт; параметр чирпа $C = 0$ нм/см;
амплитуда модуляции $\overline{\delta n} = 0{,}0001$

На рис. 1 приведены спектры отраженного света для однородных решеток, имеющих длину 0,3 и 3,0 см при равномерном возбуждении обеих мод мощностью 0,5 Вт каждая. На графиках отчетливо видны три резонанса. Крайние, наиболее сильные, резонансы соответствуют отражению мод самих в себя. Центральный резонанс соответствует перекрестной связи мод. При увеличении длины от 0,3 до 3,0 см достигается максимальный уровень отраженной мощности для крайних резонансов (насыщение отражательной способности ВБР).

На рис. 2, *a*, *d* и *g* приведены спектры отраженного света для чирпированных решеток со следующими параметрами (соответственно):

$C = 25$ нм/см, $L = 0{,}2$ см; $C = 300$ нм/см, $L = 0{,}2$ см; $C = 150$ нм/см, $L = 0{,}4$ см.

Эти спектры относятся к случаю равномерного возбуждения обеих мод мощностью 0,5 Вт каждая. При невысоком значении параметра чирпа C (рис. 2, *a*) резонансы I и III начинают пересекаться с перекрестным резонансом II, что обнаруживается возникновением интерференционных осцилляций в местах пересечения. Чтобы лучше показать пересечение резонансов, на рис. 2, *b* приведены спектральные зависимости мощности обратных мод LP_{01} и LP_{02} при наличии только одной падающей (LP_{01})-моды, (либо (LP_{02})-моды) мощностью 0,5 Вт. Две составляющие обратной моды LP_{01}, обусловленные падением прямых мод LP_{01} и LP_{02}, интерферируют между собой (см. рис. 2, *c*, синяя кривая).

Аналогично две составляющие обратной (LP_{02})-моды, обусловленные падением прямых мод LP_{02} и LP_{01}, интерферируют между собой (см. рис. 2, *c*, красная кривая) Таким образом, спектр мощности света, отраженного от чирпированной МВБР, представляющий собой сумму спектров мощностей, отраженных в моды LP_{01} и LP_{02}, имеет уширенный и интерференционный характер. При дальнейшем увеличении значения параметра чирпа (рис. 2, *d* – *f*) можно получить широкую область пересечения крайних резонансов с перекрестным и между собой (см. рис. 2, *e*), и, соответственно, единую область отражения в суммарном спектре, изрезанную интерференционными осцилляциями (см. рис. 2, *d*). При этом удлинение решетки (см. рис. 2, *g* – *k*) ведет к росту частоты этих осцилляций.

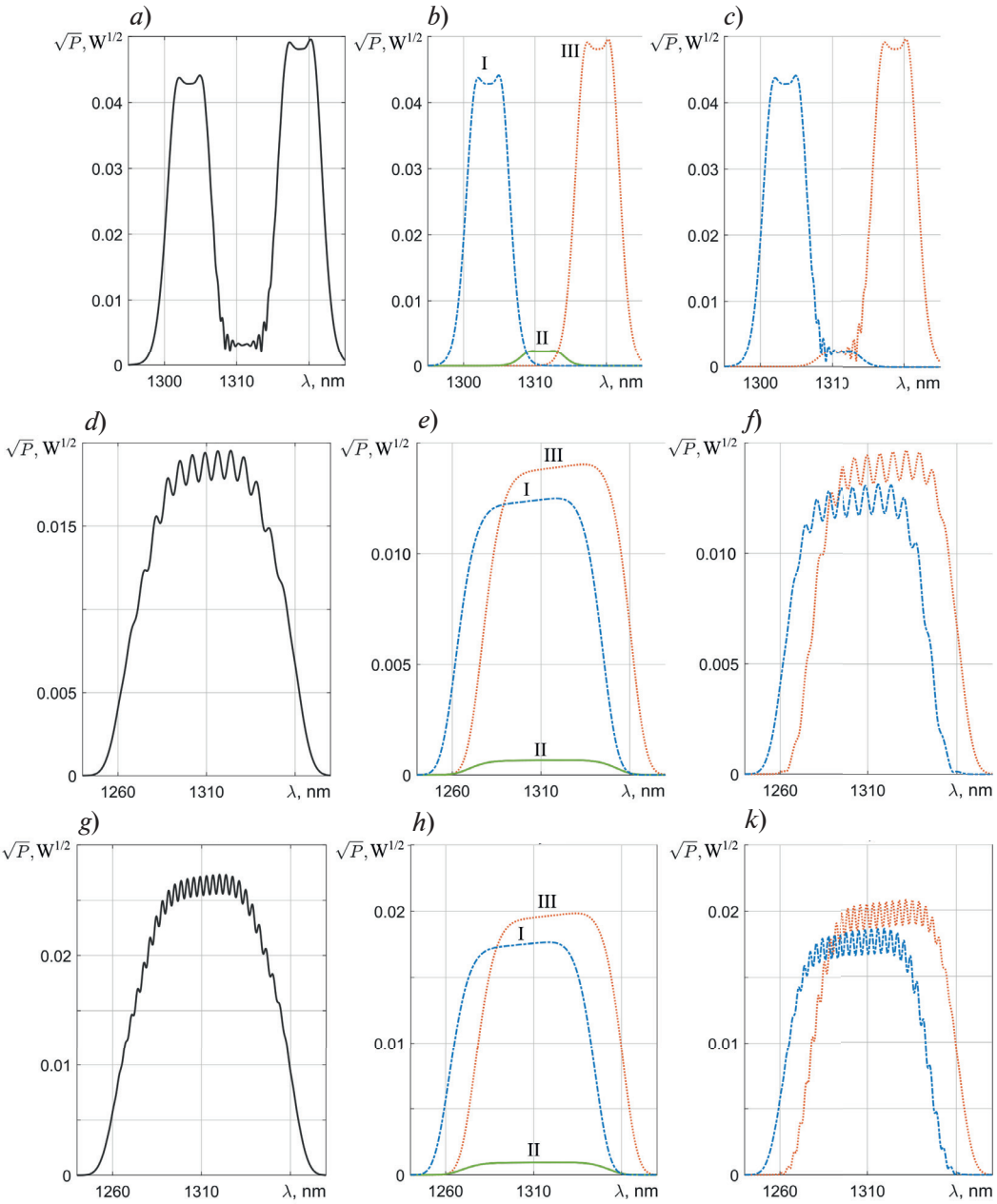


Рис. 2. Поведение спектров мощности света, отраженного в моды, при разных условиях возбуждения (см. таблицу), а также при варьировании значений ключевых параметров решетки. *C*, нм/см: 25 (*a* – *c*), 300 (*d* – *f*) и 150 (*g* – *k*); *L* = 0,2 см (*a* – *f*) и 0,4 см (*g* – *k*); $\overline{\delta n} = 10^{-4}(a - k)$

Таблица

Таблица соответствия кривых на рис. 2

Позиция на рис. 2	Цвет кривой	Мощность отраженной моды (либо их суммы)	Условие возбуждения (каждая мода 0,5 Вт)
a), *d*), *g*)	черный	суммарная обеих отраженных мод	обеими модами (LP_{01}+ LP_{02})
b), *e*), *h*)	синий	одной LP_{01}	одной LP_{01}
b), *e*), *h*)	красный	одной LP_{02}	одной LP_{02}
b), *e*), *h*)	зеленый	одной LP_{01}	одной LP_{02}
b), *e*), *h*)	зеленый	одной LP_{02}	одной LP_{01}
c), *f*), *k*)	синий	одной LP_{01}	обеими (LP_{01}+ LP_{02})
c), *f*), *k*)	красный	одной LP_{02}	обеими

На втором этапе исследования параметры решетки целенаправленно подбирались таким образом, чтобы сформировать единый пик в спектре отражения МВБР при равномерном возбуждении падающих мод суммарной мощностью 1,0 Вт (мощность каждой 0,5 Вт) и максимально поднять уровень отраженной мощности. При этом была выбрана гауссова функция аподизации (m = 1, $G = 1/\sqrt{2}$), которая обычно возникает естественным образом при ультрафиолетовой записи через фазовую маску. Результаты расчетов представлены на рис. 3. При неэкстремальных параметрах решетки C = 16 нм/см, L = 1,5 см, $\delta n = 10^{-4}$ максимальная отраженная мощность составила 0,5% от падающей (см. рис. 3, *a*). При увеличении длины решетки до 15 см (экстремальная длина для

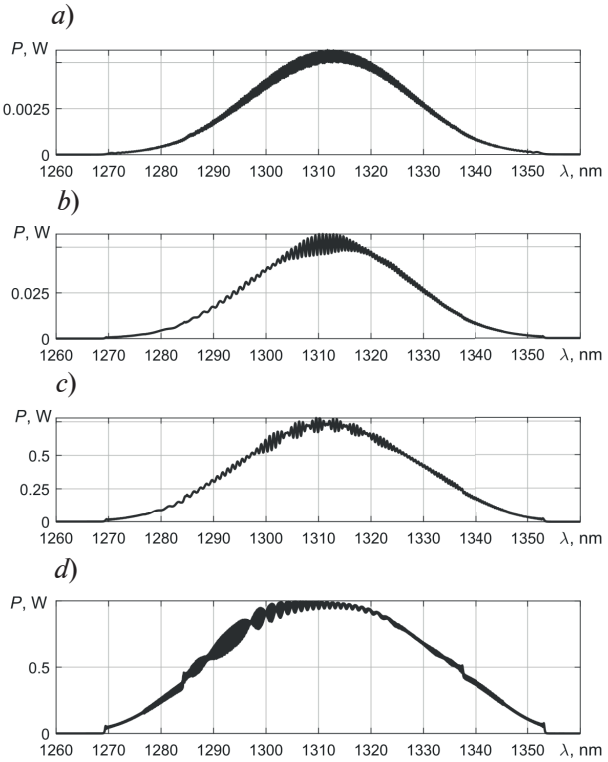


Рис. 3. Спектры мощности отраженного света для четырех вариантов чирпированных решеток (*a* – *d*).

Уровни мощности падающих мод $|R_{in,1}|^2 = |R_{in,2}|^2 = 0{,}5$ Вт; C, нм/см: 16 (*a*), 1,6 (*b*, *c*) и 0,48 (*d*); L, см: 1,5 (*a*), 15 (*b*, *c*) и 50 (*d*); $\delta n = 1 \cdot 10^{-4}$ (*a*, *b*) и $5 \cdot 10^{-4}$ (*c*, *d*)

фазовой маски) уровень отраженной мощности возрос до 5% (см. рис. 3, *b*). При увеличении амплитуды модуляции решетки до $\delta n = 5 \cdot 10^{-4}$, что потенциально возможно для волокон с сердцевиной из чистого кварца, можно получить уровень отражения, равный 70% (см. рис. 3, *c*). При дальнейшем же увеличении длины до 50 см (это возможно при ультрафиолетовой записи с протяжкой волокна при записи [18]), можно достичь уровня, равного 98%.

Заключение

В работе путем численного расчета показана пригодность коммерчески доступного ступенчатого многомодового волокна Thorlabs FG025LJA для наблюдения спектров отражения МВБР в двухмодовом режиме. Получены спектры отражения однородных и чирпированных многомодовых брэгговских решеток. Продемонстрирована возможность наблюдения эффектов уширения и интерференции резонансов в спектре решетки при типичных параметрах записи МВБР. Показана возможность формирования единого пика отражения величиной до 70% и 98% от уровня падающей мощности излучения при экстремальных, но технически достижимых параметрах записи решетки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Alhussein A. N., Qaid M. R., Agliullin T., Valeev B., Morozov O., Sakhabutdinov A.** Fiber Bragg grating sensors: Design, applications, and comparison with other sensing technologies // Sensors. 2025. Vol. 25 No. 7. P. 2289.

2. **Бутов О. В., Томышев К. А., Нечепуренко И. А., Дорофеенко А. В., Никитов С. А.** Волоконные брэгговские решетки с наклонными штрихами и сенсоры на их основе // Успехи физических наук. 2022. Т. 192. № 12. С. 1385–1398.

3. **Lu C., Cui Y.** Fiber Bragg grating spectra in multimode optical fibers // Journal of Lightwave Technology. 2006. Vol. 24. No. 1. Pp. 598–604.

4. **Xu J., Liu T., Dai X., Su Y., Shi J., Zheng Y., Dai S., Zhang P.** Multi-mode fiber Bragg grating for simultaneous detection of strain, torsion and temperature // Optics & Laser Technology. 2024. Vol. 179. December. P. 111293.

5. **Markvart A. A., Liokumovich L. B., Medvedev I. O., Ushakov N. A.** Smartphone-based interrogation of a chirped FBG strain sensor inscribed in a multimode fiber // Journal of Lightwave Technology. 2020. Vol. 39. No. 1. Pp. 282–289.

6. **Pospori A., Ioannou A., Chapalo I., Mégret P., Kalli K.** Advanced polymer fiber Bragg grating sensors and applications // IEEE Sensors Reviews. 2026. Vol. 3. January. Pp. 285–294.

7. **Guo Q., Jia Z., Pan X., Liu S., Tian Z., Zheng Z., Chen C., Qin G., Yu Y.** Sapphire-derived fiber Bragg gratings for high temperature sensing // Crystals. 2021. Vol. 11. No. 8. P. 946.

8. **Каблуков С. И., Злобина Е. А., Скворцов М. И., Немов И. Н., Вольф А. А., Достовалов А. В., Бабин С. А.** Селекция мод в волоконном ВКР-лазере с прямой диодной накачкой при использовании ВБР в многомодовом градиентном световоде // Квантовая электроника. 2016. Т. 46. № 12. С. 1106–1109.

9. **Poozesh R., Madanipour K., Vatani V.** Spectral interference fringes in chirped large-mode-area fiber Bragg gratings // Optical Fiber Technology. 2016. Vol. 31. September. Pp. 134–137.

10. **Lim K. S., Islam M. R., Lee Y. S., Yang H. Z., Ahmad H.** LP_{01}–LP_{11} cross-mode interference in a chirped grating inscribed in two-mode fiber // IEEE Journal of Quantum Electronics. 2016. Vol. 52. No. 6. P. 6600206 (6 p.).

11. **Chapalo I., Ioannou A., Sarakatsianos V., Kalli K., Pissadakis S.** Strategies for efficient interrogation of multimode fiber Bragg gratings // Journal of Lightwave Technology. 2026. Vol. 44. No. 5. Pp. 1881–1890.

12. Thorlabs. Multimode fiber FG025LJA. Режим доступа: https://www.thorlabs.com/item/FG025LJA (дата обращения: 31.03.2026).

13. **Erdogan T.** Fiber grating spectra // Journal of Lightwave Technology. 1997. Vol. 15. No. 8. Pp. 1277–1294.

14. O-Eland. Phase mask. Режим доступа: https://oeland.com/FiberGratingProducts/phasemask_others/Phasemask.php (Дата обращения: 30.03.2026).

15. **Albert J., Fokine M., Margulis W.** Grating formation in pure silica-core fibers // Optics Letters. 2002. Vol. 27. No. 10. Pp. 809–811.

16. **Аглиуллин Т. А., Анфиногентов В. И., Булат И. В., Садыкова А. И., Сахабутдинов А. Ж.** Моделирование спектра отражения комбинированного волоконно-оптического датчика // Электроника, фотоника и киберфизические системы. 2022. Т. 2. № 3. С. 46–61.

17. **Fazzi L., Klyukin D., Groves R. M.** Transfer matrix method for fundamental LP_{01} core mode coupling in a tilted FBG sensor // AIP Conference Proceedings. 2020. Vol. 2293. No. 1. P. 200010.

18. **Chung K. M., Dong L., Lu C., Tam H. Y.** Novel fiber Bragg grating fabrication system for long gratings with independent apodization and with local phase and wavelength control // Optics Express. 2011. Vol. 19. No. 13. Pp. 12664–12672.

REFERENCES

1. **Alhussein A. N., Qaid M. R., Agliullin T., et al.,** Fiber Bragg grating sensors: design, applications, and comparison with other sensing technologies, Sensors. 25 (7) (2025) 2289.

2. **Butov O. V., Tomyshev K. A., Nechepurenko I. A., et al.,** Tilted fiber Bragg gratings and their sensing applications, Phys. Usp. 65 (12) (2022) 1290–1302.

3. **Lu C., Cui Y.,** Fiber Bragg grating spectra in multimode optical fibers, J. Lightwave Technol. 24 (1) (2006) 598–604.

4. **Xu J., Liu T., Dai X., et al.,** Multi-mode fiber Bragg grating for simultaneous detection of strain, torsion and temperature, Opt. Laser Technol. 179 (Dec) (2024) 111293.

5. **Markvart A. A., Liokumovich L. B., Medvedev I. O., Ushakov N. A.,** Smartphone-based interrogation of a chirped FBG strain sensor inscribed in a multimode fiber, J. Lightwave Technol. 39 (1) (2020) 282–289.

6. **Pospori A., Ioannou A., Chapalo I., et al.,** Advanced polymer fiber Bragg grating sensors and applications, IEEE Sens. Rev. 3 (Jan) (2026) 285–294.

7. **Guo Q., Jia Z., Pan X., et al.,** Sapphire-derived fiber Bragg gratings for high temperature sensing, Crystals. 11 (8) (2021) 946.

8. **Kablukov S. I., Zlobina E. A., Skvortsov M. I., et al.,** Mode selection in a directly diode-pumped Raman fibre laser using FBGs in a graded-index multimode fibre, Quantum Electron. 46 (12) (2016) 1106–1109.

9. **Poozesh R., Madanipour K., Vatani V.,** Spectral interference fringes in chirped large-mode-area fiber Bragg gratings, Opt. Fiber Technol. 31 (Sept) (2016) 134–137.

10. **Lim K. S., Islam M. R., Lee Y. S., et al.,** LP_{01}–LP_{11} cross-mode interference in a chirped grating inscribed in two-mode fiber, IEEE J. Quantum Electron. 52 (6) (2016) 6600206.

11. **Chapalo I., Ioannou A., Sarakatsianos V., et al.,** Strategies for efficient interrogation of multimode fiber Bragg gratings, J. Lightwave Technol. 44 (5) (2026) 1881–1890.

12. Thorlabs. Multimode fiber FG025LJA, https://www.thorlabs.com/item/FG025LJA. Accessed March 31, 2026.

13. **Erdogan T.,** Fiber grating spectra, J. Lightwave Technol. 15 (8) (1997) 1277–1294.

14. O-Eland. Phase mask, https://oeland.com/FiberGratingProducts/phasemask_others/Phasemask.php. Accessed March 30, 2026.

15. **Albert J., Fokine M., Margulis W.,** Grating formation in pure silica-core fibers, Opt. Lett. 27 (10) (2002) 809–811.

16. **Agliullin T. A., Anfinogentov V. I., Bulat I. V., et al.,** Simulation of the reflection spectrum of a combined fiber-optical sensor, Electronics, Photonics and Cyberphysical Systems. 2 (3) (2022) 46–61 (in Russian).

17. **Fazzi L., Klyukin D., Groves R. M.,** Transfer matrix method for fundamental LP_{01} core mode coupling in a tilted FBG sensor, AIP Conf. Proc. 2293 (1) (2020) 200010.

18. **Chung K. M., Dong L., Lu C., Tam H. Y.,** Novel fiber Bragg grating fabrication system for long gratings with independent apodization and with local phase and wavelength control, Opt. Express. 19 (13) (2011) 12664–12672.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАРКВАРТ Александр Александрович – *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

aleksandr-markvart@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-8080-0830

ЗАВАЛИШИНА Любовь Дмитриевна – *стажер-исследователь научной лаборатории «Волоконная оптика» Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
l.zavalishina9121@mail.ru
ORCID: 0009-0009-2008-7266

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

УШАКОВ Николай Александрович – *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
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

THE AUTHORS

MARKVART Aleksandr A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
aleksandr-markvart@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

ZAVALISHINA Liubov D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
l.zavalishina9121@mail.ru
ORCID: 0009-0009-2008-7266

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

USHAKOV Nikolai A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

Статья поступила в редакцию 15.04.2026. Одобрена после рецензирования 29.04.2026. Принята 29.04.2026.
Received 15.04.2026. Approved after reviewing 29.04.2026. Accepted 29.04.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Механика

Научная статья
УДК 534.1
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19315

НЕЛИНЕЙНЫЕ КОЛЕБАНИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА, УСТАНОВЛЕННОГО НА ВЯЗКОУПРУГИХ КОЛЕБЛЮЩИХСЯ ОПОРАХ

Н. К. Эсанов ✉
Азиатский международный университет, г. Бухара, Республика Узбекистан
✉ esanovnuriddin06@gmail.com

Аннотация. В работе рассмотрены нелинейные колебания твердого тела, установленного на вязкоупругих колеблющихся опорах. Уравнения движения системы выражались через уравнения Лагранжа II рода для системы с упругими опорами путем замены жесткостей опор интегральными операторами Больцмана – Вольтерра; это позволило получить интегро-дифференциальные обыкновенные нелинейные дифференциальные уравнения. Периодическое решение уравнения системы интегро-дифференциальных уравнений искалось в виде бесконечных рядов. Численные результаты получены для ядра релаксации Ржаницына – Колтунова. Построены амплитудно-частотные характеристики центра масс твердого тела с двумя степенями свободы.

Ключевые слова: периодическое решение, уравнения Лагранжа II рода, нелинейные дифференциальные уравнения, бесконечные ряды

Для цитирования: Эсанов Н. К. Нелинейные колебания твердого тела, установленного на вязкоупругих колеблющихся опорах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 3. С. 183–191. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.19315

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19315

NONLINEAR VIBRATIONS OF A SOLID BODY INSTALLED ON VISCOUS-ELASTIC VIBRATING SUPPORTS

N. K. Esanov ✉
Asia International University, Bukhara, Republic of Uzbekistan
✉ esanovnuriddin06@gmail.com

Abstract. In this paper, the nonlinear vibrations of a rigid body mounted on viscoelastic vibrating supports have been studied. The equations of motion of the system were expressed through the Lagrange equations of the second kind for a system with elastic supports by replacing the support stiffnesses with Boltzmann – Volterra integral operators; this way made it possible to obtain a system of nonlinear integro-differential ordinary differential equations. A periodic solution of the resulting system of integro-differential equations was sought in the form of infinite series. Numerical results for the Rzhanitsyn – Koltunov relaxation kernel were obtained. The amplitude-frequency characteristics of the center of mass of the rigid body with two degrees of freedom were constructed.

Keywords: periodic solution, Lagrange equations of the second kind, nonlinear differential equations, infinite series

For citation: Esanov N. K., Nonlinear vibrations of a solid body installed on viscous-elastic vibrating supports, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (3) (2026) 183–191. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19315

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

© Эсанов Н. К., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Введение

В современных условиях существенно возрастают требования к виброустойчивости бортовых радиоэлектронных устройств (РЭУ), что связано с усилением внешних механических воздействий в процессе их эксплуатации [1, 2]. Для снижения влияния вибрационных нагрузок применяются различные средства виброзащиты: демпфирующие вставки, упругие элементы, прокладки и амортизаторы. Наиболее эффективными считаются активные амортизаторы, конструкция которых включает не только пассивные демпфирующие компоненты, но и элементы с собственным источником питания. Наличие таких элементов позволяет изменять жесткость подвески и тем самым регулировать уровень вибрационных воздействий на РЭУ в широком диапазоне рабочих частот [3, 4]. Применение подобных систем виброзащиты обеспечивает снижение амплитуд колебаний не только в области резонансных частот, но и по всему рабочему частотному диапазону.

Однако расширение функциональных возможностей приводит к усложнению конструкции из-за необходимости применения дополнительных датчиков и средств контроля вибраций. В связи с этим использование активных амортизаторов целесообразно лишь для особо ответственных радиоэлектронных систем. Кроме того, каждый амортизатор требует предварительной настройки на определенную рабочую частоту, чаще всего соответствующую первой собственной частоте защищаемого устройства. Поскольку это значение может варьироваться от изделия к изделию, возникает необходимость применения адаптивных виброзащитных механизмов, способных подстраиваться под реальные динамические свойства объекта [5, 6].

Наибольшее негативное действие вибраций, как известно, приходится на печатные платы и функциональные модули РЭУ. В расчетных схемах они, как правило, моделируются в виде конструкций с двумя плоскостями симметрии, опирающихся на фиксированные точки крепления [7, 8]. На практике применение виброзащиты становится особенно важным в области резонансных частот, поскольку воздействия вне резонансной зоны, как показывают исследования, обычно не оказывают существенного влияния на надежность и работоспособность радиоэлектронной аппаратуры [9, 10].

При проектировании систем защиты радиоэлектронных устройств от внешних вибраций, в резонансных режимах используются положения механики и методы математического моделирования, что позволяет корректно описывать динамическое поведение блоков и оценивать эффективность применяемых защитных элементов.

Постановка задачи

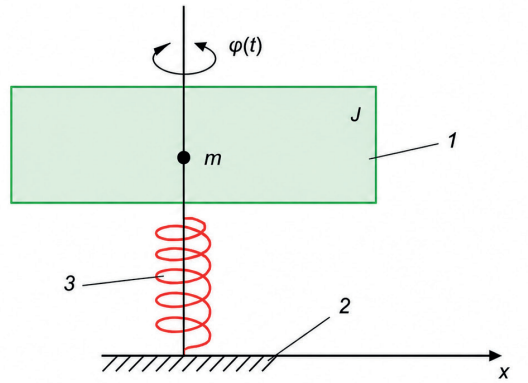


Рис. 1. Схема к постановке задачи: твердое тело *1* массой m и моментом инерции J опирается на неподвижную основу *2* через вязкоупругие безмассовые элементы *3*; φ – мгновенный угол поворота

Рассмотрим динамическое поведение механической системы, схема которой представлена на рис. 1. Жесткое тело *1* опирается на неподвижную плиту *2* через вязкоупругие элементы *3*. Требуется определить амплитудно-частотные характеристики точек жесткого тела при гармоническом воздействии, задаваемом движением опорной плиты.

Для вывода уравнений движения используем формализм Лагранжа II рода. При этом влияние упругих опор учитывается путем замены их жесткостей соответствующими интегральными операторами, описывающими наследственные свойства вязкоупругой среды [11]:

© Esanov N. K., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

$$
\begin{aligned}
&m\ddot{x}_c + c_x x_c - cl\varphi - \varepsilon_1\left[c_x\int_{-\infty}^{t} R_x(t-\tau)x_c(\tau)\,d\tau + c_x l\int_{\infty}^{t} R_x(t-\tau)\varphi(\tau)\,d\tau\right] = \\
&= A\sin\nu t + \varepsilon\frac{c_x l}{6}\left[\varphi^3 - \int_{-\infty}^{t} R_x(t-\tau)\varphi^3(\tau)\,d\tau\right], \\
&I\ddot{\varphi} - c_x l x_c - \left(c_\varphi + c_x l^2\right)\varphi + \\
&+\varepsilon_1\left\{c_x l\int_{-\infty}^{t} R_x(t-\tau)x_c(\tau)\,d\tau - \int_{-\infty}^{t}\left[c_\varphi R_\varphi(t-\tau) + c_x l^2 R_\varphi(t-\tau)\right]\varphi(\tau)\,d\tau\right\} = \\
&= \varepsilon\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{c_x l}{2}\left[\varphi^2 x_c - \displaystyle\int_{-\infty}^{t} R_x(t-\tau)\varphi^2(\tau)x_c(\tau)\,d\tau\right] + \\ +\dfrac{8}{6}\left[\varphi^3 - \displaystyle\int_{-\infty}^{t} R_x(t-\tau)\varphi^3(\tau)\,d\tau\right] \end{array}\right\},
\end{aligned}
\tag{1}
$$

где m – масса тела; c_x, c_φ – жесткости опор в направлении двух обобщенных координат; I – момент инерции; R_x, R_φ – ядра релаксации по направлениям x и φ (φ – мгновенный угол поворота тела); x_c – перемещение центра масс тела; ε – малый параметр нелинейности; ν – частота вынужденных колебаний; l – расстояние от центра масс до точки опоры; τ – переменная интегрирования; t – время.

Порождающая система (1) при $\varepsilon = 0$ выражается характеристическими уравнениями колебаний следующего вида:

$$
\omega_{1,2}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{c_x l^2 + c_\varphi}{I} + \frac{c_x}{m}\right) \pm \sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{c_x l^2 + c_\varphi}{I} + \frac{c_x}{m}\right)^2 - \frac{c_x c_\varphi}{mI}},
\tag{2}
$$

где $\omega_{1,2}$ – собственные угловые частоты колебаний системы.

Метод решения поставленной задачи

Проведем для уравнений движения (1) переход к нормальным колебаниям, представив решение вложением по нормальным формам f_1 и f_2:

$$
x = a_{11}f_1 + a_{12}f_2,\ \varphi = a_{21}f_1 + a_{22}f_2.
\tag{3}
$$

Удовлетворим уравнения колебаний (2) при $\varepsilon = \varepsilon_1 = 0$ функциями

$$
\left.\begin{array}{l} x = a_{11}\sin(\omega_1 t + \alpha_1),\ x = a_{21}\sin(\omega_2 t + \alpha_2), \\ \varphi = a_{21}\sin(\omega_1 t + \alpha_1),\ \varphi = a_{22}\sin(\omega_2 t + \alpha_2) \end{array}\right\},
\tag{4}
$$

где a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22} – искомые амплитудные коэффициенты;
α_1, α_2 – начальные фазовые углы, определяемые начальными условиями.

Подставив функции (4) в уравнения (1), получим вспомогательные соотношения вида

$$
\left.\begin{array}{l} -ma_{11}\omega_1^2 + c_x l a_{11} - c_x l a_{21} = 0, \\ -Ia_{21}\omega_1^2 - c_x l a_{11} + \left(c_x l^2 + c_c\right)a_{21} = 0, \\ -ma_{12}\omega_2^2 + c_x l a_{12} - c_x l a_{22} = 0, \\ -Ia_{22}\omega_2^2 - c_x l a_{12} + \left(c_x l^2 + c_c\right)a_{22} = 0 \end{array}\right\},
\tag{5}
$$

позволяющие определить амплитуды a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22} следующим образом:

$$\left.\begin{aligned} a_{21} &= \frac{m\omega_1^2 + c_x x_c + c_x l}{c_x l^2 + c_x l + c_\varphi - I\omega_1^2}, \\ a_{22} &= -\frac{m\omega_2^2 + c_x l - c_x l}{c_x l^2 - c_x + c_\varphi - I\omega_2^2}, \\ a_{11} &= a_{12} = 1. \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Таким образом, система (1) с учетом решения (3) и соотношений (5) приобретает вид

$$\ddot{f}_1 + \Omega_2\left[f_1 - \int_{-\infty}^{t} R_1(t-\tau) f_1(\tau)\, d\tau\right] = P\sin\nu t + F_1(f_1, f_2), \tag{7}$$

$$\ddot{f}_2 + \Omega^2\left[f_2 - \int_{-\infty}^{t} R_2(t-\tau) f_2(\tau)\, d\tau\right] = F_2(f_1, f_2). \tag{8}$$

Периодические решения (7) и (8), в соответствии с данным работ [12, 13], выразим следующим образом:

$$f_1 = f_{1,0} + \sum_{n=1}^{\infty}\left[f_{1,n} - f_{1,n(n-1)}\right], \tag{9}$$

$$f_2 = f_{2,0} + \sum_{n=1}^{\infty}\left[f_{2,n} - f_{2,n(n-1)}\right]. \tag{10}$$

Подставив решения (9) и (10) в уравнения (7) и (8) соответственно, получим систему уравнений [14]:

$$\left.\begin{aligned} \ddot{f}_{1,n} + \Omega^2\left[f_{1,n} - \int_{-\infty}^{t} R_1(t-\tau) f_{1,n}(\tau)\, d\tau\right] &= D\sin\nu t + F_1\left(f_{1,(n-1)}, f_{2,(n-1)}\right), \\ \ddot{f}_{2,n} + \Omega^2\left[f_{2,n} - \int_{-\infty}^{t} R_2(t-\tau) f_{2,n}(\tau)\, d\tau\right] &= F_2\left(f_{1,(n-1)}, f_{2,(n-1)}\right) \end{aligned}\right\}, \tag{11}$$

где D – амплитуда вынуждающей силы.

Пусть функции $F_1(f_1, f_2)$ и $F_2(f_1, f_2)$ представимы в виде равномерно сходящихся рядов Фурье

$$\left.\begin{aligned} F_1(f_1, f_2) &= \sum_{k_1=0}^{\infty} \psi_{k_1} \sin\left(\mu_k t + \nu_k\right), \\ F_2(f_1, f_2) &= \sum_{k_2=0}^{\infty} \psi_{k_2} \sin\left(\mu_k t + \nu_k\right) \end{aligned}\right\}, \tag{12}$$

где ψ_k – коэффициенты (амплитуды) рядов Фурье; μ_k – круговая частота k-й гармоники; ν_k – начальная фаза (фазовый сдвиг) k-й гармоники; k – номер гармоники.

Решение уравнений (9) и (10) при условиях $F_1(f_1, f_2) = F_2(f_1, f_2) = 0$ будет иметь вид

$$\left.\begin{aligned} f_1(t) &= \sum_{k_1=0}^{\infty} c_{k_1} \sin\left(\mu_k t + \beta_k\right), \\ f_2(t) &= \sum_{k_2=0}^{\infty} c_{k_2} \sin\left(\mu_k t + \beta_k\right) \end{aligned}\right\}, \tag{13}$$

где

$$\left.\begin{aligned} c_{k_1} &= \frac{F_{k_1}}{\left\{\Omega^4 R_{sk} + \left[\Omega^2\left(1 - R'_{ck}\right) - \mu_k^2\right]^2\right\}^{1/2}}, \\ c_{k_2} &= \frac{F_{k_2}}{\left\{\Omega^4 R_{sk} + \left[\Omega^2\left(1 - R'_{ck}\right) - \mu_k^2\right]^2\right\}^{1/2}}, \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

$$R'_{sk} = \int_0^\infty R(\tau)\sin\mu_k\tau d\tau;\ R'_{ck} = \int_0^\infty R(\tau)\cos\mu_k\tau d\tau; \tag{15}$$

при этом R'_{sk} и R'_{ck} определяются выражениями (15), а константы β_k удовлетворяют уравнению

$$\operatorname{tg}(\gamma_k - \beta_k) = \frac{\Omega^2 R_k}{\Omega^2(1 - R_{ck}) - \mu_k^2}. \tag{16}$$

Ряд (12) сходится абсолютно и равномерно при условии $0 < R_c < 1$. Функция (14) не содержит произвольных постоянных и описывает установившиеся вынужденные колебания системы под действием периодического возмущения вида (13).

Перейдем теперь к анализу нелинейных интегро-дифференциальных уравнений (11):

$$\left.\begin{aligned} \ddot{f}_{1n} + \Omega_1^2\left[f_{1n} - \int_{-\infty}^{t} R_1(t-\tau) f_{1n}(\tau) d\tau\right] &= D_1 \sin\nu t + \mu F_{1n}(f_1, f_2), \\ \ddot{f}_{2n} + \Omega_2^2\left[f_{2n} - \int_{-\infty}^{t} R_2(t-\tau) f_{2n}(\tau) d\tau\right] &= D_2 \sin\nu t + \mu F_{2n}(f_1, f_2). \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

где f_{1n}, f_{2n} – искомые функции; Ω – известная константа; $F_{1n}(f_1, f_2)$, $F_{2n}(f_1, f_2)$ – известные функции; μ – безразмерный положительный параметр.

Предполагаем, что ядро R удовлетворяет условию

$$0 < \int_0^{+\infty} R(\tau)\, d\tau < 1, \tag{18}$$

а функции $F_{1n}(f_1, f_2)$, $F_{2n}(f_1, f_2)$ представимы бесконечным рядом.

Периодическое решение уравнения (17) будем искать в виде бесконечных рядов:

$$\left.\begin{aligned} f_{1n}(t) &= f_{10}(t) + \sum_{k=0}^{\infty}\left[f_{1k}(t) - f_{1(k-1)}(t)\right], \\ f_{2n}(t) &= f_{20}(t) + \sum_{k=0}^{\infty}\left[f_{2k}(t) - f_{2(k-1)}(t)\right], \end{aligned}\right\} \tag{19}$$

при этом каждое слагаемое данного ряда соответствует частному решению соответствующих линейных уравнений:

$$\ddot{f}_{10}+\Omega^2\left[f_{1,0}-\int_{-\infty}^{t}R_1(t-\tau)f_{10}(\tau)d\tau\right]=D_1\sin\nu t,$$
$$\ddot{f}_{20}+\Omega^2\left[f_{2,0}-\int_{-\infty}^{t}R_2(t-\tau)f_{20}(\tau)d\tau\right]=D_2\sin\nu t,$$
$$\ldots\ldots\ldots

Полученные результаты свидетельствуют о том, что нелинейные эффекты вносят заметный (но сравнительно небольшой) вклад в амплитудно-частотные характеристики системы. Превышение амплитуды в нелинейном случае на (3 – 4) %, по сравнению с линейным, указывает на необходимость учета нелинейных членов при прецизионных расчетах виброзащитных систем, особенно в окрестности резонансных частот. При этом качественное совпадение результатов для различных уровней вязкости подтверждает устойчивость предложенного метода решения.

Следует отметить, что существенно бóльшие значения амплитуд при малой вязкости объясняются ослаблением диссипативных свойств материала опор, что снижает эффективность гашения колебаний. Данный факт согласуется с известными результатами теории вязкоупругости [3, 16] и указывает на практическую важность подбора материалов опор с оптимальными диссипативными характеристиками. Учет вязких свойств материала позволяет снизить амплитуды колебаний вплоть до 15%, что подтверждает целесообразность применения вязкоупругих элементов в конструкциях виброзащиты радиоэлектронных устройств.

Заключение

В настоящей работе исследованы нелинейные колебания твердого тела, установленного на вязкоупругих колеблющихся опорах. Разработана методика решения задачи и алгоритм для пассивной пространственной диссипативной механической системы с конечным числом степеней свободы. На основе формализма Лагранжа II рода, с заменой жесткостей опор интегральными операторами Больцмана – Вольтерра, получены общие уравнения движения виброизолируемых диссипативных механических систем в форме интегро-дифференциальных уравнений.

Предложена общая методика решения нелинейных уравнений, основанная на методе последовательных приближений, с представлением периодических решений в виде бесконечных рядов. Численные результаты, полученные для ядра релаксации Ржаницына – Колтунова, показали, что значение амплитуды для нелинейной задачи превышает амплитуду для линейной на (3 – 4)%, а учет вязких свойств материала опор позволяет снизить амплитуды колебаний до 15%.

Анализ полученных численных результатов подтвердил эффективность подбора жесткостных характеристик деформируемых элементов для обеспечения виброзащиты.

Дальнейшие исследования могут быть направлены на расширение и усовершенствование модели путем учета большего числа степеней свободы, применения других ядер релаксации, а также на экспериментальную верификацию полученных теоретических результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вибрации в технике: Справочник: в 6 тт. Т. 6. Защита от вибраций и ударов. Под ред. К. В. Фролова. М.: Машиностроение, 1981. 456 с.

2. **Токарев М. Ф., Талицкий Е. Н., Фролов В. А.** Механические воздействия и защита радиоэлектронной аппаратуры. Под ред. В. А. Фролова. М.: Радио и связь, 1984. 224 с.

3. **Нашиф А., Джоунс Д., Хендерсон Дж.** Демпфирование колебаний. Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 448 с.

4. **Mirsaidov M. M., Safarov I. I., Teshaev M. Kh.** Oscillations of multilayer viscoelastic composite toroidal pipes // Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics. 2019. Vol. 13. No. 2. Pp. 105–116.

5. **Глудкин О. П.** Методы и устройства испытания РЭС и ЭВС. М.: Высшая школа, 2001. 335 с.

6. **Глудкин О. П., Енгалычев А. Н., Коробов А. И., Трегубов Ю. В.** Испытания радиоэлектронной, электронно-вычислительной аппаратуры и испытательное оборудование. М.: Радио и связь, 2002. 272 с.

7. **Лысенко А. В., Граб И. Д., Горячев Н. В., Кемалов Б. К., Юрков Н. К.** Краткий обзор методов имитационного моделирования // Современные информационные технологии. 2011. № 14. С. 171–176.

8. **Федоров В., Сергеев Н., Кондрашин А.** Контроль и испытания в проектировании и производстве радиоэлектронных средств. М.: Техносфера, 2005. 504 с.

9. **Sahu S. K., Datta P. K.** Dynamic stability of laminated composite curved panels with cutouts // Journal of Engineering Mechanics. 2003. Vol. 129. No. 11. Pp. 1245–1253.

10. **Каленкович Н. И., Боровиков С. М., Ткачук А. М., Образцов Н. С.** Радиоэлектронная аппаратура и основы ее конструкторского проектирования. Минск: БГУИР (Белорусский гос. ун-т информатики и радиоэлектроники), 2009. 187 с.

11. **Юрков Н. К.** Технология радиоэлектронных средств. Пенза: Изд-во ПензГУ, 2012. 640 с.

12. **Кофанов Ю. Н., Шалумов А. С., Гольдин В. В., Журавский В. Г.** Математическое моделирование радиоэлектронных средств при механических воздействиях. М.: Радио и связь, 2000. 226 с.

13. **Capatti M. C., Carbonari S., Gara F., Roia D., Dezi F.** Experimental study on instrumented micropiles // 2016 IEEE Workshop on Environmental, Energy, and Structural Monitoring Systems (EESMS). Bari, Italy (Proceedings of the Conference), 2016. Report 7504831. Pp. 1–6.

14. **Adamo F., Attivissimo F., Lanzolla A. M. L.** Assessment of the uncertainty in human exposure to vibration: an experimental study // IEEE Sensors Journal. 2014. Vol. 14. No. 2. Pp. 474–481.

15. **Palacios-Quiconero F., Karimi H. R., Rubiy-Massegú J., Rossell-Garriga J. M.** Passive-damping design for vibration control of large structures // Proceedings of the 2013 10th IEEE International Conference on Control and Automation (ICCA). Hangzhou, China, 2013. Pp. 33–38.

16. **Zhang X., Sun D., Song Y., Yan B.** Dynamics characteristic study of the visco-elastic suspension system of construction vehicles // Proceedings of International Conference "Technology and Innovation Conference 2009 (ITIC 2009)"; Beijing, China, October 12–14, 2009. IET Conference Publications, 2010. Pp. 1–4.

REFERENCES

1. Vibratsii v tekhnike: Spravochnik v 6 tt. T. 6. [Vibrations in technics. Reference book. Vols. 1–6., Vol. 6], Zashchita ot vibratsii i udarov [Protection from vibrations and shocks], K.V. Frolov (Ed.), Mashinostroenie, Moscow, 1981 (in Russian).

2. **Tokarev M. F., Talitskiy E. N., Frolov V. A.,** Mekhanicheskie vozdeistviya i zashchita radioelektronnoy apparatury [Mechanical impacts and protection of radio electronic equipment], Radio i sviaz'[Radio & Communications Publishing], Moscow, 1984 (in Russian).

3. **Nashif A. D., Jones D. I. G., Henderson J. P.,** Vibration damping, Wiley Interscience Journals, New York, 1985.

4. **Mirsaidov M. M., Safarov I. I., Teshaev M. Kh.,** Oscillations of multilayer viscoelastic composite toroidal pipes, J. Serb. Soc. Comput. Mech. 13 (2) (2019) 105–116.

5. **Gludkin O. P.,** Metody i ustroistva ispytaniya RES i EVS [Methods and devices for testing radio-electronic and computing systems], Vysshaya Shkola Publishing, Moscow, 2001 (in Russian).

6. **Gludkin O. P., Engalichev A. N., Korobov A. I., Tregubov E, V.,** Ispytaniya radioelektronnoy, elektronno-vychislitel'noy apparatury i ispytatel'noye oborudovaniye [Testing of radio electronic, computing devices and testing equipment], Radio i sviaz' [Radio & Communications Publishing], Moscow, 2002.

7. **Lysenko A. V., Grab I. D., Goryachev N. V., et al.,** Brief review of methods of simulation, Sovremennye informatsionnye tekhnologii [Modern Information Technologies]. (14) (2011) 171–176 (in Russian).

8. **Fedorov V., Sergeev N., Kondrashin A.,** Kontrol' i ispytaniya v proektirovanii i proizvodstve radioelektronnykh sredstv [Control and testing in design and production of electronic equipment], Tekhnosphera Publ., Moscow, 2005 (in Russian).

9. **Sahu S. K., Datta P. K.,** Dynamic stability of laminated composite curved panels with cutouts, J. Eng. Mech. 129 (11) (2003) 1245–1253.

10. **Kalenkovich N. I., Borovikov S., M., Tkachuk A. M., Obraztsov N. S.,** Radioelektronnaya apparatura i osnovy eyo konstruktorskogo proektirovaniya [Radio-electronic equipment and the principles of its design], Belarussian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, 2008 (in Russian).

11. **Iurkov N. K.,** Tekhnologiya radioelektronnykh sredstv [Radio-electronic technology], Penza State University Publishing, Penza, 2012 (in Russian).

12. **Kofanov Iu. N., Shalumov A. S., Gol'din V. V., Zhuravskiy V. G.,** Matematicheskoye modelirovaniye radioelektronnykh sredstv pri mekhanicheskikh vozdeistviyakh [Simulation of radio-electronic equipment subjected to mechanical stress], Radio i sviaz' [Radio & Communications Publishing], Moscow, 2000 (in Russian).

13. **Capatti M. C., Carbonari S., Gara F., et al.,** Experimental study on instrumented micropiles, 2016 IEEE Workshop on Environmental, Energy, and Structural Monitoring Systems (EESMS). Bari, Italy (Proc. Conf.), Rep. 7504831 (2016) 1–6.

14. **Adamo F., Attivissimo F., Lanzolla A. M. L.,** Assessment of the uncertainty in human exposure to vibration: an experimental study, IEEE Sens. J. 14 (2) (2014) 474–481.

15. **Palacios-Quiconero F., Karimi H. R., Rubiy-Massegú J., Rossell-Garriga J. M.,** Passive-damping design for vibration control of large structures, Proc. 2013 10th IEEE Int. Conf. on Control and Automation (ICCA), Hangzhou, China (2013) 33–38.

16. **Zhang X., Sun D., Song Y., Yan B.,** Dynamics characteristic study of the visco-elastic suspension system of construction vehicles, Proc. Int. Conf. "Technology and Innovation Conf. 2009 (ITIC 2009)"; Beijing, China, Oct. 12–14, 2009, Rep. 1508, IET Conf. Publications (2010) 1–4.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЭСАНОВ Нуриддин Курбанович – *кандидат технических наук, доцент кафедры педагогики и психологии Азиатского международного университета, г. Бухара, Республика Узбекистан.*

10000, Узбекистан, г. Бухара, ул. Гиждуван, 74
esanovnuriddin06@gmail.com
ORCID: 0009-0000-7443-6040

THE AUTHOR

ESANOV Nuriddin K.
Asia International University
74 Gijduvan St., Bukhara, 10000, Republic of Uzbekistan
esanovnuriddin06@gmail.com
ORCID: 0009-0000-7443-6040

Статья поступила в редакцию 07.12.2025. Одобрена после рецензирования 17.05.2026. Принята 17.05.2026.

Received 07.12.2025. Approved after reviewing 17.05.2026. Accepted 17.05.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научное издание

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

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS»

ТОМ 19, № 3, 2026

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 № ФС77-52144 от 11.12.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А. С. Колгатина – переводчик
Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

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 30.09.2026 г. Дата выхода в свет 30.10.2026 г.
Формат 60x84/8. Печать цифровая.
Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .
Цена: Бесплатно.

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,
Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.
Сайт журнала: https://physmath.spbstu.ru/