



ISSN 2077-8708

**Проблемы
физики,
математики
и техники**

№4 (53) 2022

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ
ЖУРНАЛ
«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ,
МАТЕМАТИКИ
И ТЕХНИКИ»**

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:
С.А. Хахомов (Беларусь)

**ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО
РЕДАКТОРА:**
А.В. Рогачёв (Беларусь)
О.М. Демиденко (Беларусь)

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:
В.Е. Агабеков (Беларусь)
П.Н. Богданович (Беларусь)
А.Ф. Васильев (Беларусь)
Го Вэньбинь (Китай)
С.С. Гиргель (Беларусь)
В.И. Громак (Беларусь)
А.Н. Дудин (Беларусь)
В.А. Еровенко (Беларусь)
А.И. Калинин (Беларусь)
Матс Ларссон (Швеция)
В.Д. Мазуров (Россия)
Н.В. Максименко (Беларусь)
Ю.В. Малинковский (Беларусь)
А.Р. Миротин (Беларусь)
В.В. Можаровский (Беларусь)
В.С. Монахов (Беларусь)
Н.К. Мышкин (Беларусь)
Ю.М. Плескачевский (Беларусь)
М.В. Селькин (Беларусь)
И.В. Семченко (Беларусь)
А.Н. Сердюков (Беларусь)
А. Сихвола (Финляндия)
А.Н. Скиба (Беларусь)
С.А. Третьяков (Финляндия)

ОТВЕТСТВЕННЫЙ СЕКРЕТАРЬ:
Е.А. Ружицкая (Беларусь)

АДРЕС РЕДАКЦИИ:
Гомельский государственный
университет имени Франциска Скорины
ул. Советская, 104,
246028, г. Гомель, Беларусь
Тел. +375(232)51-00-77
+375(232)51-03-21
E-mail: pfmt@gsu.by
Интернет-адрес: <http://pfmt.gsu.by>

**SCIENTIFIC AND TECHNICAL
JOURNAL
«PROBLEMS OF PHYSICS,
MATHEMATICS
AND TECHNICS»**

EDITOR-IN-CHIEF:
S.A. Khakhomov (Belarus)

DEPUTY EDITORS-IN-CHIEF:
A.V. Rogachev (Belarus)
O.M. Demidenko (Belarus)

EDITORIAL BOARD:
V.E. Agabekov (Belarus)
P.N. Bogdanovich (Belarus)
A.F. Vasilyev (Belarus)
Guo Wenbin (China)
S.S. Girgel (Belarus)
V.I. Gromak (Belarus)
A.N. Dudin (Belarus)
V.A. Erovenko (Belarus)
A.I. Kalinin (Belarus)
Mats Larsson (Sweden)
V.D. Mazurov (Russia)
N.V. Maksimenko (Belarus)
Yu.V. Malinkovsky (Belarus)
A.R. Mirotin (Belarus)
V.V. Mozharovsky (Belarus)
V.S. Monakhov (Belarus)
N.K. Myshkin (Belarus)
Yu.M. Pleskachevsky (Belarus)
M.V. Selkin (Belarus)
I.V. Semchenko (Belarus)
A.N. Serdyukov (Belarus)
A. Sihvola (Finland)
A.N. Skiba (Belarus)
S.A. Tretyakov (Finland)

EXECUTIVE SECRETARY:
E.A. Ruzhitskaya (Belarus)

EDITION ADDRESS:
Francisk Skorina Gomel State University
Sovetskaya Str., 104,
246028, Gomel, Republic of Belarus
Ph. +375(232)51-00-77
+375(232)51-03-21
E-mail: pfmt@gsu.by
Website: <http://pfmt.gsu.by>

ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ, МАТЕМАТИКИ И ТЕХНИКИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Издается с декабря 2009 г.

Выходит 4 раза в год

№ 4 (53) 2022

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

- Ахраменко Н.А., Деликатная И.О., Доценко Е.И.** К нахождению максимумов в опыте Юнга 7
- Васькевич В.В., Гайшун В.Е., Коваленко Д.Л., Сидский В.В., Семченко А.В., Косенок Я.А., Насонова Н.В.** Светопоглощающие золь-гель покрытия для применения в оптической технике . . 10
- Гиргель С.С.** Энергетические характеристики векторных циркулярных пучков Куммера конечной мощности. I. Однородная поляризация 16
- Данильченко К.Д., Масвский А.А., Семченко А.В., Сидский В.В., Васькевич В.В., Гайшун В.Е., Коваленко Д.Л., Тюленкова О.И., Насонова Н.В.** Исследование физических свойств композиционных антистатических покрытий, синтезированных золь-гель методом 21
- Дей Е.А., Тюменков Г.Ю.** О приведенной форме термодинамических коэффициентов реальных газов 25
- Емельянов В.А., Шершнев Е.Б., Никитюк Ю.В., Соколов С.И., Аушев И.Ю.** Оптимизация параметров лазерной обработки алмазов 30
- Можаровский В.В., Киргинцева С.В.** Реализация математической модели расчета собственных колебаний трубопровода (сосуда) из композита 37
- Павленко А.В., Гришечкин Ю.А.** Точные решения двумерного уравнения Логанова – Тавхелидзе с некоторыми аналогами потенциала гармонического осциллятора в импульсном представлении 43
- Руденков А.С., Ярмоленко М.А.** Морфология и структура наноконпозиционных полимерных покрытий, содержащих формиаг свинца 46
- Толкачёв А.И., Шамына А.А., Капшай В.Н.** Анализ энергетических характеристик излучения второй гармоники, генерируемого в диэлектрических цилиндрических частицах большой высоты 53
- Ярмоленко М.А., Рогачев А.В., Руденков А.С., Емельянов В.А., Фролов С.А., Михалко А.М.** Влияние лазерного ассистирования на процессы генерации летучих продуктов диспергирования композиционных мишеней на основе ПЭ и их реакционную активность 64

МАТЕМАТИКА

- Бычков П.В., Каморников С.Ф., Тютянов В.Н.** О центре графа, определяемого подгруппами Шмидта конечной группы 73
- Малинковский Ю.В.** Квазиобратимость систем обслуживания с нестандартными групповыми перемещениями заявок 80

ИНФОРМАТИКА

- Савёнок В.А., Таранчук В.Б.** Возможности и средства библиотеки Nevod при решении задач извлечения временных указателей в тексте 84

Учредитель – Учреждение образования «Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины»

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь
(свидетельство о регистрации № 492 от 15 июня 2009 г.)

Журнал включен в Перечень научных изданий Республики Беларусь для опубликования
результатов диссертационных исследований по следующим отраслям науки:

- технические;
- физико-математические.

Приказ Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 4 июля 2005 г. № 101 (в редак-
ции приказа Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 2 февраля 2011 г. № 26), реше-
ние коллегии Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 8 июля 2011 г. № 13/1, приказ
Председателя Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 1 февраля 2012 г. № 21.
Приказы Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 31.12.2020 № 338, № 339.

Журнал «Проблемы физики, математики и техники» реферируется в Реферативном журнале и Базах
данных Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ) Российской Акаде-
мии наук (Москва) и в реферативном математическом журнале «Zentralblatt MATH» (Берлин, Германия).

Ежегодно ВИНИТИ РАН подает сведения в мировую справочную систему периодических изданий
«Ulrich's Periodical Directory» о реферировании журнала «Проблемы физики, математики и техники» в
Реферативном журнале ВИНИТИ РАН.

Журнал включен в Общероссийский математический портал Math-Net.Ru и Научную электронную
библиотеку eLIBRARY.RU.

Технический редактор *Е.А. Ружицкая*
Корректоры *И.А. Хорсун, Т.А. Фицнер*
Дизайн обложки *А.В. Ермаков*

Подписано в печать 08.12.22. Формат 60×84 $\frac{1}{8}$. Бумага офсетная. Гарнитура Times.
Усл. печ. л. 11,16. Уч.-изд. л. 9,72. Тираж 103 экз. Заказ № 642.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования
«Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины».
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий № 1/87 от 18.11.2013.
Специальное разрешение (лицензия) № 02330/450 от 18.12.2013
ул. Советская, 104, 246028, Гомель

© Учреждение образования
«Гомельский государственный
университет имени Франциска Скорины», 2022
© Проблемы физики, математики и техники, 2022
© Problems of Physics, Mathematics and Technics, 2022

PROBLEMS OF PHYSICS, MATHEMATICS AND TECHNICS

SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL

Published since December 2009

Released quarterly

№ 4 (53) 2022

CONTENTS

PHYSICS

Akhramenko N.A., Delikatnaya I.O., Dotsenko E.I. To finding the maximums in Young's experience	7
Vaskevich V.V., Gaishun V.E., Kovalenko D.L., Sidsky V.V., Semchenko A.V., Kosenok Y.A., Nasonova N.V. Light-absorbing sol-gel coatings for applications in optical technology	10
Girgel S.S. Energy properties of the vector circular Kummer beams with terminating power. I. The homogeneous polarization	16
Danilchenko K.D., Maevsky A.A., Semchenko A.V., Sidski V.V., Vaskevich V.V., Gaishun V.E., Kovalenko D.L., Tyulenкова O.I., Nasonova N.V. Study of the physical properties of composite antistatic coatings synthesized by sol-gel method	21
Dey E.A., Tyumenkov G.Yu. On the reduced form of thermodynamic coefficients of real gases ..	25
Emelyanov V.A., Shershnev E.B., Nikitjuk Y.V., Sokolov S.I., Aushev I.Y. Optimization of laser processing of diamonds	30
Mozharovskiy V.V., Kirhintsava S.V. Implementation of a mathematical model for calculating natural vibrations of a pipeline (vessel) made of composite	37
Paulenko A.V., Grishchkin Yu.A. Exact solutions of the two-dimensional Logunov – Tavkhelidze equation with some analogues of the harmonic oscillator potential in the momentum representation	43
Rudnikov A.S., Yarmolenko M.A. Morphology and structure of nanocomposite polymer coatings containing lead formate	46
Talkachov A.I., Shamyna A.A., Kapshai V.N. Analysis of energy characteristics of the second-harmonic generation in long cylindrical dielectric particles	53
Yarmolenko M.A., Rogachev A.V., Rudnikov A.S., Emelyanov V.A., Frolov S.A., Mikhalko A.M. Influence of laser assistance on the processes of volatile products dispersion generation of composite targets based on polyethylene and their reactivity	64

MATHEMATICS

Bychkov P.V., Kamornikov S.F., Tyutyaynov V.N. On the center of a graph defined by Schmidt subgroups of a finite group	73
Malinkovskii Yu.V. Quasireversibility of queuing systems with nonstandard batch customer motion	80

INFORMATION SCIENCE

Savionok V.A., Taranchuk V.B. Features and tools of the Nevod library in solving problems of extracting temporal markers in the text	84
---	----

Founder – Francisk Skorina Gomel State University

The journal is registered in the Ministry of information of Belarus
(registration certificate № 492 from June, 15th, 2009)

The journal is included in the List of scientific editions of Belarus for publication of dissertational researches results on the following branches of science:

- **Technics;**
- **Physics and Mathematics.**

The journal «Problems of Physics, Mathematics and Technics» is reviewed in Abstract journal and Databases of the All-Russia Institute of Scientific and Technical Information (VINITI) of the Russian Academy of Sciences (Moscow) and in abstract mathematical journal «Zentralblatt MATH» (Berlin, Germany).

Annually the VINITI of the Russian Academy of Sciences submits data review of the journal «Problems of Physics, Mathematics and Technics» in Abstract journal VINITI of the Russian Academy of Sciences to the world Help of periodicals «Ulrich's Periodical Directory».

The Journal is included in all-Russian Mathematical Portal Math-Net.Ru and Scientific Electronic Library eLIBRARY.RU.

К НАХОЖДЕНИЮ МАКСИМУМОВ В ОПЫТЕ ЮНГА

Н.А. Ахраменко, И.О. Деликатная, Е.И. Доценко

Белорусский государственный университет транспорта, Гомель

TO FINDING THE MAXIMUMS IN YOUNG'S EXPERIENCE

N.A. Akhramenko, I.O. Delikatnaya, E.I. Dotsenko

Belarusian State University of Transport, Gomel

Аннотация. В литературе по физике, посвященной разделу «Оптика», рассматриваются различные схемы наблюдения интерференции, среди которых существенное место занимает опыт Юнга. Максимумы интерференции в этом опыте описываются довольно простой формулой. Расстояния между соседними интерференционными полосами, следующие из этой формулы, являются одинаковыми для любого порядка максимума. В данной работе рассматривается возможное уточнение нахождения максимумов интерференции и как это повлияет на расстояние между соседними интерференционными полосами.

Ключевые слова: интерференция, ход лучей, условия максимумов, когерентность.

Для цитирования: Ахраменко, Н.А. К нахождению максимумов в опыте Юнга / Н.А. Ахраменко, И.О. Деликатная, Е.И. Доценко // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 7–9. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_7. – EDN: CDBYZP

Abstract. In the physics literature devoted to the section “Optics”, various schemes for observing interference are considered, among which Young’s experiment occupies a significant place. The interference maxima in this experiment are described with a fairly simple formula. The distances between adjacent interference fringes, following from this formula, are the same for any order of maximum. In this paper, we consider a possible refinement of finding interference maxima and how this will affect the distance between adjacent interference fringes.

Keywords: interference, ray path, maxima conditions, coherence.

For citation: Akhramenko, N.A. To finding the maximums in Young’s experience / N.A. Akhramenko, I.O. Delikatnaya, E.I. Dotsenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 7–9. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_7. – EDN: CDBYZP

Introduction

In 1802, Thomas Young conducted his experiment on the scattering of light. Two holes, very close to each other, were made with a pin in an opaque screen. They were illuminated by sunlight passing through a small hole in the screen. Light passing through holes in an opaque screen, expanding due to diffraction, forms two light cones. They partially overlap on the screen for observation. In the area of their overlap, one can observe the alternation of dark and light stripes. A similar experiment is carried out using narrow long slots [1]–[7].

The observation of an interference pattern means that light has wave properties (particle-wave dualism of light). Interference can only be observed for coherent light sources. It is practically impossible to create two different coherent sources, therefore all interference experiments are based on the creation of two or more secondary sources from one primary one.

This is done using various optical systems, for example using reflection or refraction. In Young’s experiment, two slits in the screen serve as coherent sources. In this case, the interference pattern is

observed on a screen, the distance to which is much greater than the distance between the sources (slits). An experiment similar to Young’s was done by Grimaldi as early as 1665, but he used the sun as a source to directly illuminate holes in the screen. In this case, interference could not be observed due to the large angular dimensions of the Sun [1].

The conditions for interference maxima have the form [1]–[7]:

$$x_k = k \frac{L}{d} \lambda, \quad (0.1)$$

where x_k – is the coordinates of the maxima, k – is an integer, L – is the distance from the slits to the screen, d – is the distance between the slits, λ – is the light wavelength.

The distance between adjacent interference fringes is the same for any number k

$$x_{k+1} - x_k = \frac{L}{d} \lambda. \quad (0.2)$$

Formula (0.1) is still not exact. In this paper, we consider the question of how the refinement of the x_k maxima will affect the distance between the interference fringes.

1 Scheme of experience

In Young's experiment, light from a source (figure 1.1) falls on a narrow slit (1), and through it, on two slits parallel to it (2). On the screen (E) in the region of overlap of the obtained coherent light beams, parallel interference fringes are observed. When using lasers that generate practically parallel beams of rays, slit (1) is not needed in Young's experiment [1].

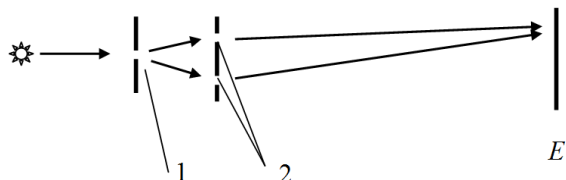


Figure 1.1 – Light from a source is incident on the screen through two slits

Two slits in the screen, which are coherent sources, will be denoted by S_1 and S_2 . The path of the rays is shown in figure 1.2.

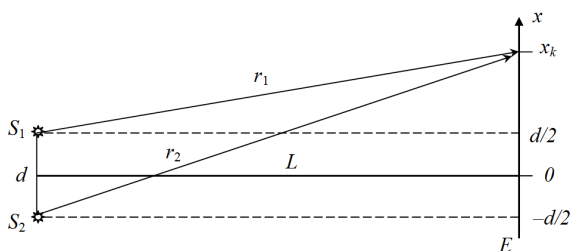


Figure 1.2 – The path of the rays from two slits to the point of observation

The difference between the optical lengths r_2 and r_1 of two beams coming from the sources S_2 and S_1 , respectively, to the observation point (for vacuum, the optical length corresponds to the geometric one)

$$\Delta = r_2 - r_1. \quad (1.1)$$

The conditions for interference maxima have the form:

$$\Delta = k\lambda. \quad (1.2)$$

From the consideration of right triangles in figure 1.2

$$r_1 = \sqrt{L^2 + \left(x_k - \frac{d}{2}\right)^2}, \quad (1.3)$$

$$r_2 = \sqrt{L^2 + \left(x_k + \frac{d}{2}\right)^2}. \quad (1.4)$$

Then the conditions for the coordinates of the maxima, taking into account relations (1.1), (1.2), (1.3) and (1.4)

$$k\lambda = \sqrt{L^2 + \left(x_k + \frac{d}{2}\right)^2} - \sqrt{L^2 + \left(x_k - \frac{d}{2}\right)^2}. \quad (1.5)$$

Let's transform the ratio (1.5)

$$k\lambda = L\sqrt{1 + \frac{\left(x_k + \frac{d}{2}\right)^2}{L^2}} - L\sqrt{1 + \frac{\left(x_k - \frac{d}{2}\right)^2}{L^2}}. \quad (1.6)$$

2 Approximate analytical solution

We use several terms of the expansion of the square root in powers

$$\sqrt{1 + \alpha} \approx 1 + \frac{1}{2}\alpha - \frac{1}{8}\alpha^2. \quad (2.1)$$

Considering that $L \gg d$ and $L \gg x_k$, from expressions (1.6) and (2.1) we obtain

$$k\lambda = \frac{x_k d}{L} \left(1 - \frac{x_k^2}{2L^2} - \frac{d^2}{8L^2}\right). \quad (2.2)$$

From the consideration of expression (2.2) it follows that the distance between the interference fringes cannot be obtained similarly to formula (0.2). That is, refining the position of the maxima x_k leads to the fact that the distance between adjacent interference fringes is not the same.

From expression (2.2) we obtain

$$x_k = \frac{k\lambda L}{d \left(1 - \frac{x_k^2}{2L^2} - \frac{d^2}{8L^2}\right)}. \quad (2.3)$$

If the expression in parentheses in the denominator is approximately equal to one, then we obtain formula (0.1). Due to the fact that the bracket in expression (2.3) is less than unity, the coordinates of the maxima following from (2.3) will be slightly larger than the corresponding coordinates from formula (0.1).

To find x_k , we reduce expression (2.2) to a cubic equation

$$x_k^3 - 2L^2 \left(1 - \frac{d^2}{8L^2}\right) x_k + 2L^3 \frac{k\lambda}{d} = 0. \quad (2.4)$$

The resulting cubic equation (2.4) immediately has a canonical form. To solve it, it is convenient to apply the Vieta trigonometric formula (you can also use the Cardano formula). We will carry out calculations for a particular case.

Table 2.1 – Results of calculations of maxima and distances between neighboring maxima

k	x_k, mm	$x_{k+1} - x_k, mm$	$\frac{x_{k+2} - x_{k+1}}{x_{k+1} - x_k}$
1	±2,500000325	2,50000220	1,00000149
2	±5,000002525	2,50000595	1,00000224
3	±7,500008475	2,500011575	1,00000299
4	±10,000020050	2,500019075	1,00000375
5	±12,500039125	2,500028451	1,00000449
6	±15,000067576	2,500039701	1,00000525
7	±17,500107277	2,500052827	1,00000600
8	±20,000160104	2,500067828	1,00000675
9	±22,500227932	2,500084705	–
10	±25,000312637	–	–

The results of calculations for $d = 10^{-3} m$, $L = 5 m$, $\lambda = 5 \cdot 10^{-7} m$ are shown in Table 2.1. The second column shows the coordinates obtained from formula (2.4), and the third column shows the distance between adjacent strips.

Conclusions

From the above calculations (table 2.1) and the analysis of expression (2.3) it can be seen that the refinement of the interference maxima leads to the fact that the distance between adjacent interference fringes is not the same. This distance is slightly larger than that calculated by formula (0.2). In this case, one more regularity is traced – the distance between adjacent interference fringes increases monotonically with an increase in the order of maximum (k), although this increase is insignificant.

REFERENCES

1. *Sivukhin, D.V.* General course of physics. Volume 4. Optics. / D.V. Sivukhin. – M.: Nauka, 1980. – 752 p.
2. *Raymond A. Serway.* Physics for Scientists and Engineers (with PhysicsNOW and info Trac) / Raymond A. Serway, John W. Jewett: 6th ed., Thomson Brooks / Cole, 2004. – 1296 p.
3. *Detlaf, A.A.* Physics course: textbook. allowance for higher educational institutions / A.A. Detlaf, B.M. Yavorsky – 4th ed., corrected. – M.: Higher. School, 2002. – 718 p.
4. *Saveliev, I.V.* Course of general physics. In 3 volumes. Vol. 2: Electricity and Magnetism. Waves. Optics / Savelyev I.V. – 2nd ed., revised. – M.: Nauka, 1982. – 496 p.
5. *Trofimova, T.I.* Physics course: textbook. allowance for universities / T.I. Trofimova. – 17th ed., Sr. – M.: Publishing Center “Academy”, 2008. – 560 p.
6. *Landsberg, G.S.* Optics. Proc. allowance: For universities. / G.S. Landsberg – 6th ed., Sr. – M.: FIZMATLIT, 2003. – 848 p.
7. *Shilyaeva, K.P.* Physics. Brief theory and tasks: manual / K.P. Shilyaeva, I.O. Delikatnaya, N.A. Akhramenko. – Gomel: BelSUT, 2021. – 211 p.

Поступила в редакцию 03.11.2022.

Информация об авторах

Ахраменко Николай Арсеньевич – к.т.н., доцент
Деликатная Ирина Олеговна – к.т.н., доцент
Доценко Елена Иосифовна – ст. преподаватель

УДК 539.23, 535-92, 661.682

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_10
EDN: CMVFFF**СВЕТОПОГЛОЩАЮЩИЕ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ПОКРЫТИЯ
ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОПТИЧЕСКОЙ ТЕХНИКЕ****В.В. Васькевич¹, В.Е. Гайшун¹, Д.Л. Коваленко¹, В.В. Сидский¹, А.В. Семченко¹,
Я.А. Косенок¹, Н.В. Насонова²**¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск**LIGHT-ABSORBING SOL-GEL COATINGS
FOR APPLICATIONS IN OPTICAL TECHNOLOGY****V.V. Vaskevich¹, V.E. Gaishun¹, D.L. Kovalenko¹, V.V. Sidsky¹, A.V. Semchenko¹,
Y.A. Kosenok¹, N.V. Nasonova²**¹Francisk Skorina Gomel State University²Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk

Аннотация. Представлена методика получения композиционных золь-гель покрытий, содержащих мелкодисперсные формы порошков углерода. Разработаны оптимальные составы и подобраны режимы нанесения и термообработки формируемых покрытий на подложках из алюминия. Приведены результаты исследования толщины, адгезии к подложке, твердости и стойкости к циклическому воздействию смены температур (от минус 30° С до плюс 100° С). Установлено влияние концентрации вводимых порошков углерода на коэффициент отражения сформированных золь-гель покрытий.

Ключевые слова: пленкообразующий раствор, золь-гель, термообработка, толщина покрытия, адгезия, твердость, коэффициент отражения.

Для цитирования: Светопоглощающие золь-гель покрытия для применения в оптической технике / В.В. Васькевич, В.Е. Гайшун, Д.Л. Коваленко, В.В. Сидский, А.В. Семченко, Я.А. Косенок, Н.В. Насонова // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 10–15. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_10. – EDN: CMVFFF

Abstract. A technique for obtaining composite sol-gel coatings containing finely dispersed forms of carbon powders is presented. Optimal compositions have been developed and modes of deposition and heat treatment of formed coatings on aluminum substrates have been selected. The results of the study of thickness, adhesion to the substrate, hardness and resistance to cyclic effects of temperature changes (from minus 20° C to plus 150° C) are presented. The influence of the concentration of introduced carbon powders on the reflection coefficient of the formed sol-gel coatings has been established.

Keywords: film-forming solution, sol-gel, heat treatment, coating thickness, adhesion, hardness, reflection coefficient.

For citation: Light-absorbing sol-gel coatings for applications in optical technology / V.V. Vaskevich, V.E. Gaishun, D.L. Kovalenko, V.V. Sidsky, A.V. Semchenko, Y.A. Kosenok, N.V. Nasonova // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 10–15. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_10 (in Russian). – EDN: CMVFFF

Введение

Решение проблемы снижения рассеянного светового фона, а также создание эффективных светопоглощающих покрытий для применения в оптических приборах является актуальной задачей. В настоящее время использование различных технологий требует устранения нежелательного отражения от поверхностей в оптических системах и приборостроении, в частности, при производстве фоточувствительных и пироэлектрических датчиков, солнечных тепловых коллекторов, корпусов приборов для оптики и др. [1].

Снижение отражения становится возможным при использовании оптических покрытий, принцип действия которых схож с поведением абсолютного черного тела, то есть, максимально

возможное поглощение падающего излучения и минимизация потерь энергии через инфракрасное излучение. Таким образом, поверхность покрытия должна характеризоваться минимально возможным отражением в спектральном диапазоне видимого излучения [2].

Существует много различных методов получения антиотражающих покрытий, но их применение зачастую невозможно из-за низкой стойкости к химическому воздействию. В настоящее время наиболее распространёнными являются оксидные покрытия (анодное оксидирование, микродуговое оксидирование) [3], фосфатные покрытия (фосфатирование) и покрытия, полученные гальваническими методами (черный никель, черный хром и т. д.) [4], [5].

Современные светопоглощающие антибликовые покрытия характеризуются низким коэффициентом светопоглощения (1–2% в среднем) и низким тепловым излучением (< 40%). Однако довольно часто черные покрытия, получаемые гальваническим методом, имеют ряд недостатков: неравномерный цвет (краситель может частично смываться с поверхности детали), низкая пластичность и адгезия к поверхности металла, низкая устойчивость к воздействию ультрафиолета, низкие показатели коррозионной и износостойкости.

Одним из альтернативных и перспективных методов создания функциональных композиционных покрытий с низким отражением является золь-гель метод, позволяющий решить вышеуказанные проблемы.

Важными свойствами при получении композиционных золь-гель покрытий с низким отражением в видимой области является их адгезия, стойкость к износу и коррозионная стойкость. Для использования таких покрытий в области оптических приборов аэрокосмической техники они должны обладать стойкостью к циклическому воздействию смены температур.

1 Синтез, материалы и методы исследования

Для получения композиционных покрытий с низким отражением были разработаны составы

плёнообразующих растворов на основе соединений кремния, так как такие составы отлично подходят в качестве основы под различные наполнители, а готовые покрытия обладают необходимой адгезией, твердостью, прочностью и термостойкостью [6].

Так как поверхность алюминия даже после обработки быстро покрывается оксидным слоем, что ухудшает адгезию составов с большим содержанием наполнителя (более 20%), были разработаны плёнообразующие растворы на основе титанорганических соединений для формирования адгезионного подслоя на поверхности подложек.

Разработанные композиционные покрытия получали по схеме, представленной на рисунке 1.1.

Плёнообразующие растворы для композиционного покрытия получены из соединений метилтриэтоксисилана и тетраэтилортосиликата. В качестве растворителя использовали изопропиловый спирт. В качестве катализатора в золь добавляли водный раствор соляной кислоты. Золи для адгезионного подслоя приготовлены на основе изопропоксида титана (бутоксида титана) в изопропиловом спирте, стабилизированного этилацетатом.



Рисунок 1.1 – Схема получения композиционных светопоглощающих покрытий

После созревания в кремниевый золь вводили добавки: коллоидный графит марки С-1 (размер частиц 4 мкм), технический углерод марки N220 (размер частиц 20–50 нм), технический углерод марки П803 (размер частиц 10 мкм).

В качестве подложек использовали алюминиевый лист марки 1105А толщиной 2 мм двух размеров: круглые подложки диаметром 30 мм (для исследования коэффициента отражения), и прямоугольные подложки 100×50 мм (для исследования структурно-механических свойств).

Нанесение промежуточного адгезионного и финишного композиционного слоя осуществляли методом распыления. Преимуществом аэрозольного распыления пленкообразующего раствора является возможность покрытия поверхности произвольного размера и формы, а также возможность варьировать толщину напыляемого слоя от нескольких микрометров до 60–80 микрометров [7].

Термообработку адгезионного слоя проводили на воздухе при температуре (120–150)°С в течении 30 минут. Образующийся после формирования тонкий адгезионный TiO₂ слой, благодаря своей относительно малой толщине и образованной ковалентной связи, способствует улучшению адгезии формируемого на поверхности композиционного покрытия.

После остывания на подложки с адгезионным слоем наносили составы кремнийорганических золь, содержащих различные концентрации углерода.

Так как толщина композиционного покрытия порядка 20–30 мкм, для равномерного удаления остатков растворителя необходимо проводить поэтапную сушку: в начальный период (при интенсивном испарении растворителя), при температуре (60–100)°С в течении 20–30 минут (скорость нагрева ≈ 5°С в мин.), затем при температуре (200–250)°С в течении 30–60 минут (скорость нагрева ≈ 10°С в мин.). Скорость отверждения покрытий зависит от толщины покрытия, вида пленкообразующего раствора и концентрации наполнителя.

Полученные композиционные покрытия имеют матовую поверхность. Образец №1 с содержанием 20 масс.% углерода N220 характеризуется небольшим блеском. Покрытия с графитом имеют сероватый оттенок.

2 Результаты исследования и их обсуждение

Толщину полученных покрытий контролировали с использованием толщиномера САЕdt-156.

Так как толщина адгезионного TiO₂ слоя одинакова для всех образцов и составляет 1,8 мкм, при описании результатов толщины формируемых композиционных покрытий от результата отнимали толщину адгезионного подслоя. Результаты измерения толщины полученных композиционных покрытий, содержащих различные

виды и концентрации технического углерода представлены в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Результаты определения толщины композиционных покрытий

Вид и концентрация наполнителя	Толщина, мкм
Углерод N220 – 20 масс.%	19,8
Углерод N220 – 30 масс.%	21,2
Углерод N220 – 40 масс.%	23,5
Графит – 10 масс.%	30,7
Графит – 20 масс.%	29,9
Углерод П803 – 20 масс.%	54,2

Так как все образцы покрытия получены из одного и того же золь и отличаются только видом и концентрацией наполнителя, можно сделать вывод, что существенный вклад в толщину оказывает вид наполнителя. Частицы углерода П803 характеризуются большим размером (размер частиц 10 мкм), как следствие, полученные покрытия с наполнителем из этих частиц имеют толщину более 50 мкм. Композиционные покрытия с коллоидным графитом марки С-1 (размер частиц 4 мкм) имеют толщину 30 мкм. Самые тонкие покрытия, содержащие углерод марки N220 (размер частиц 20–50 нм), имеют толщину 20–24 мкм, которая меняется с увеличением концентрации наполнителя.

Испытание адгезионных свойств выполняется в целях контроля качества и применяется для соблюдения промышленных стандартов и технических условий. Исследование адгезионных свойств проводили согласно ГОСТ 31149-2014 методом решетчатого надреза [8]. Результаты представлены в таблице 2.2.

Таблица 2.2 – Результаты исследования адгезии методом решетчатого надреза

Вид и концентрация наполнителя	Адгезия, %	Класс (ISO 2409:2013)
Углерод N220 – 20 масс.%	100	0
Углерод N220 – 30 масс.%	99	0
Углерод N220 – 40 масс.%	100	0
Графит – 10 масс.%	99	0
Графит – 20 масс.%	98	0
Углерод П803 – 20 масс.%	92	1

Результаты испытания показали, что покрытия на основе SiO₂, содержащие углерод N220 и графит, имеют самый высокий класс адгезии согласно ISO 2409:2013 – Класс 0 (края надрезов полностью гладкие; сегменты нарезанной решетки не отслоились). Покрытия, содержащие

углерод П803, имеют класс адгезии – 1 (отслоение мелких чешуек покрытия на пересечении надрезов; площадь отслоений превышает 5% площади решетки). Стоит отметить, что использование в качестве добавки углерода П803 приводит к ухудшению адгезионных свойств и росту хрупкости покрытия.

Твердость покрытий определяли методом Вольфа – Виборна, основанным на скрабировании поверхности графитовым карандашом. Карандаши имеют твердость в диапазоне от 6В до 9Н (ГОСТ Р 54586-2011), где твердость покрытия соответствует максимальной твердости карандаша, который не повреждает покрытие [9]. На твердость могут повлиять атмосферные условия (температура и влажность), поэтому все пленки должны подготавливаться, испытываться в одинаковых условиях. Результаты измерения твердости методом Вольфа – Виборна представлены в таблице 2.3.

Таблица 2.3 – Результаты измерения твердости методом Вольфа – Виборна

Вид и концентрация наполнителя	Твердость
Углерод N220 – 20 масс.%	6Н
Углерод N220 – 30 масс.%	6Н
Углерод N220 – 40 масс.%	5Н
Графит – 10 масс.%	3Н
Графит – 20 масс.%	3Н
Углерод П803 – 20 масс.%	1Н

По результатам испытаний наиболее твердыми являются покрытия, содержащие углерод N220. Их твердость соответствует – 6Н и снижается до 5Н при концентрации наполнителя 40 масс.%. Покрытия, содержащие коллоидный графит, имеют твердость – 3Н, это связано с низкой твердостью графитового наполнителя, а используемая матрица не может обеспечить необходимую твердость покрытия. Наименьшую твердость (1Н) имеют материалы, содержащие углерод П803, это может быть связано с большим размером частиц и как результат рыхлой структурой полученных покрытий.

Исследования механической прочности полученных покрытий проводили методом истирания резиновым наконечником, изготовленным из пищевой резины средней плотности, через батиновую прокладку при следующих параметрах: частота вращения, 300 об/мин, общее число оборотов – 6000, нагрузка на наконечник 200 г, расстояние от оси вращения 50 мм.

По результатам исследования механической прочности установлено, что все образцы, за исключением покрытия, содержащего углерод П803, имеют высокую механическую стойкость к истиранию более 6000 циклов.

Таблица 2.4 – Механическая стойкость покрытий

Вид и концентрация наполнителя	Механическая стойкость, количество циклов стирания
Углерод N220 – 20 масс.%	> 6000
Углерод N220 – 30 масс.%	> 6000
Углерод N220 – 40 масс.%	> 6000
Графит – 10 масс.%	> 6000
Графит – 20 масс.%	> 6000
Углерод П803 – 20 масс.%	5400

Испытание на стойкость к термоциклированию проводили для определения способности изделия противостоять негативному действию климатического фактора и продолжать работать по окончании действия негативного фактора. После проведения испытаний продили проверку внешнего вида и механических свойств.

Во время испытания полученные образцы помещали в холодильную камеру с температурой минус $(30 \pm 3)^\circ \text{C}$ и выдерживали в течении 1 часа. Затем образцы резко извлекали и помещали в муфельную, предварительно разогретую до температуры плюс $(100 \pm 5)^\circ \text{C}$, на 1 час. Затем снова перенесли в холодильную камеру и повторяли испытание 5 раз. По окончании последнего цикла образец оставляли в условиях восстановления при комнатной температуре.

По результатам испытаний установлено, что все полученные покрытия устойчивы к термоциклированию от минус $(30 \pm 3)^\circ \text{C}$ до плюс $(100 \pm 5)^\circ \text{C}$ (5 циклов без отслаивания и растрескивания покрытия).

Изменение коэффициента отражения исследовали на спектрофотометре УФ-видимой области Cary-50 компании Agilent Technologies с установленным модулем измерения отражения в видимой области (300–1000) нм. Из спектров следует, что полученные покрытия имеют значения коэффициентов отражения менее 10% в диапазоне длин волн 300–900 нм (рисунок 2.1, а).

Использование в качестве наполнителя порошков углерода и графита с концентрацией до 30 масс.% позволяет уменьшить коэффициент отражения в указанном диапазоне спектра в 3–10 раз (кривые 1–3, 5–6, рисунок 2.1, а) по сравнению с коэффициентом отражения чистой алюминиевой подложки.

Минимальный коэффициент отражения ($\approx 0,5\%$) достигается при концентрации углерода N220 = 40 масс.% (кривая 4, рисунок 2.1, б), что соответствует лучшим образцам, полученным в работе на подложках и алюминия.

Такие низкие значения коэффициентов отражения делают полученные композиционные покрытия перспективным в производстве изделий оптико-электронной техники.

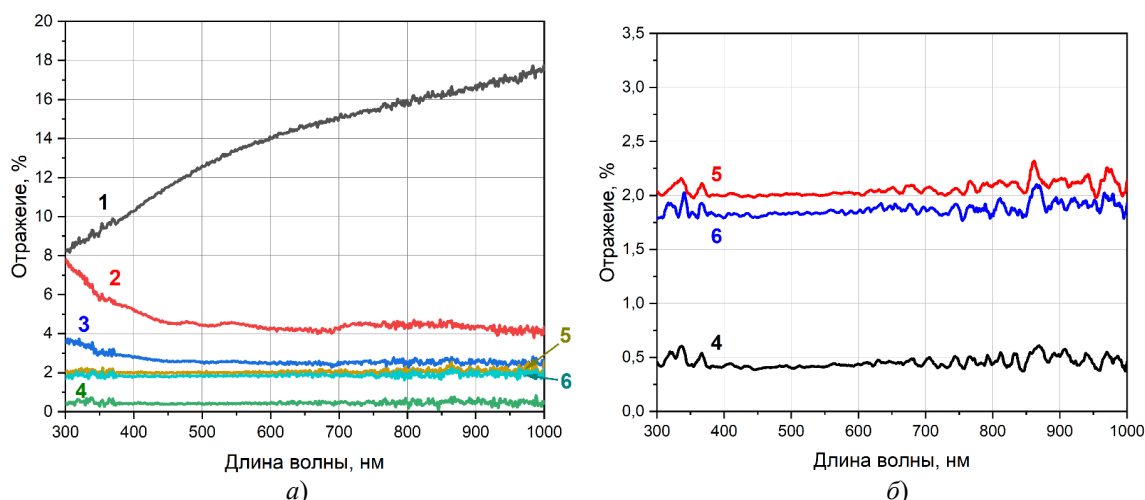


Рисунок 2.1 – Спектры отражения покрытий в видимой области:

1 – подложка из алюминия; 2 – углерод N220 20 масс.%;
 3 – углерод N220 30 масс.%; 4 – углерод N220 40 масс.%;
 5 – графит 10 масс.%; 6 – графит 20 масс.%

Заключение

Разработана методика получения светопоглощающих композиционных покрытий на основе кремния, содержащих графит и углерод. Экспериментальным путем определены оптимальные режимы нанесения пленкообразующих растворов, термообработки адгезионного слоя и композиционного покрытия. Так как композиционное покрытие имеет значительную толщину (порядка 20–50 мкм), то для формирования однородных покрытий и равномерного удаления остатков растворителя необходимо проводить поэтапную сушку.

Установлено, что толщина покрытий варьируется от 20 до 50 мкм и зависит от типа и концентрации наполнителя. Результаты испытания адгезии показали, что покрытия, содержащие углерод N220 и графит, имеют самый высокий класс адгезии согласно ISO 2409:2013 – Класс 0 (края надрезов полностью гладкие; сегменты нарезанной решетки не отслоились). Покрытия, содержащие углерод П803 имеют класс адгезии – 1 (отслоение мелких чешуек покрытия на пересечении надрезов; площадь отслоений превышает 5% площади решетки).

По результатам испытаний наиболее твердыми являются покрытия, содержащие углерод N220. Их твердость соответствует 6Н и снижается до 5Н при концентрации наполнителя 40 масс.%. Покрытия, содержащие коллоидный графит, имеют твердость 3Н, что связано с низкой твердостью графитового наполнителя, а используемая матрица не может обеспечить необходимой твердости покрытия. Наименьшую твердостью (1Н) имеют материалы, содержащие углерод П803, это может быть связано с большим размером частиц и как результат рыхлой структурой полученных покрытий.

По результатам испытаний стойкости к циклическому воздействию смены температур установлено, что все полученные покрытия устойчивы к термоциклированию от минус $(30 \pm 3)^\circ\text{C}$ до плюс $(100 \pm 5)^\circ\text{C}$ (5 циклов без отслаивания и растрескивания покрытия).

Использование композиционных покрытий, содержащих в качестве наполнителя порошков графита и углерода, позволяет уменьшить коэффициент отражения в диапазоне спектра ($\lambda = 300\text{--}1000\text{ нм}$) в 3–10 раз по сравнению с поверхностью алюминиевой подложки, при этом минимальным значением коэффициента отражения ($\approx 0,5\%$) обладают покрытия с концентрацией 40 масс.% углерода N220.

Разработанные светопоглощающие композиционные золь-гель покрытия, содержащие углерод и графит, являются перспективными материалами в оптических системах приборостроения и аэрокосмической техники.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антиотражающие наноструктурированные массивы оксида цинка, изготовленные методом импульсного электроосаждения / Н.П. Ключко, Е.С. Клепикова, Г.С. Хрипунов, Н.Д. Волкова, В.Р. Копач, В.Н. Любовь, М.В. Кириченко, А.В. Копач // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49, вып. 2 – С. 219–229.
2. Novel black selective coating for tubular solar absorbers based on a sol-gel method / M. Joly, Y. Antonetti, M. Python, M. Gonzalez, T. Gascou, J.-L. Scartezzini, A. Schüler // Solar Energy. – 2013. – № 94. – P. 233–239.
3. Структура и оптические свойства композиционного светопоглощающего покрытия, полученного методом микродугового оксидирования / А.И. Комаров, Л.С. Цыбульская, П.С. Золотая,

А.С. Романюк, С.С. Перевозников // Механика машин, механизмов и материалов. – 2019. – Т. 49, №4. – С. 79–83.

4. *Optical, structural and thermal performances of black nickel selective coatings for solar thermal collectors* / В.Р. Kafle, В. Basnet, В. Timal-sina, А. Deo, Т.Н. Malla, N. Acharya, А. Adhikari // Solar Energy. – 2022. – Vol. 234. – P. 262–274.

5. *Relative improvements in anti-reflection property of black coating produced on stainless steel 310 using conversion coating techniques* / А.Р. Re-ghuraj, К.К. Saju, А. Ritwik, N.S. Varrma // Materials today: Proceedings. – 2021. – Vol. 47, Part 15. – P. 5079–5085.

6. *Защитные золь-гель покрытия с гидрофобными свойствами* / В.Е. Гайшун, Д.Л. Коваленко, В.В. Сидский, В.В. Васькевич // Проблемы физики, математики и техники. – 2011. – № 3 (8). – С. 15–19.

7. *Исследование структурно-механических свойств защитных золь-гель покрытий на основе оксидов Si, Ti, Zr и их комплексов* / В.В. Васькевич, Д.Л. Коваленко, В.Е. Гайшун, А.С. Русыкин, М.И. Москвичёв, В.А. Черчук // Проблемы физики, математики и техники. – 2018. – № 4 (37). – С. 21–24.

8. ГОСТ 31149-2014 (ISO 2409:2013). *Материалы лакокрасочные. Определение адгезии методом решетчатого надреза*. – Введ. 01.09.2015. – Москва: ИПК Издательство стандартов, 2015. – 12 с.

9. ГОСТ Р 54586-2011 (ISO 15184:1998). *Материалы лакокрасочные. Метод определения твердости покрытия по карандашу*. – Введ. 01.09.2011. – Москва: Стандартинформ, 2012. – 12 с.

Работа выполнена при поддержке Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Материаловедение, новые материалы и технологии» 2021–2025 годы.

Поступила в редакцию 24.09.2022.

Информация об авторах

Васькевич Василий Васильевич – ст. преподаватель
Гайшун Владимир Евгеньевич – к.ф.-м. н., доцент
Коваленко Дмитрий Леонидович – к.ф.-м. н., доцент
Сидский Виталий Валерьевич – к.т. н., доцент
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Косенок Янина Александровна – к.т. н., доцент
Насонова Наталья Викторовна – д.т.н., доцент

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЕКТОРНЫХ ЦИРКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ КУММЕРА КОНЕЧНОЙ МОЩНОСТИ.

I. ОДНОРОДНАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ

С.С. Гиргель

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

ENERGY PROPERTIES OF THE VECTOR CIRCULAR KUMMER BEAMS WITH TERMINATING POWER. I. THE HOMOGENEOUS POLARIZATION

S.S. Girgel

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Предложены и исследуются аналитические выражения в замкнутой форме для векторных циркулярных 3D световых пучков Куммера с однородной поляризацией. Эти выражения не содержат гауссиана. При определенных ограничениях на свободные параметры такие пучки Куммера переносят конечную мощность. Вычислены и графически исследуются поперечные (спиновый и орбитальный) потоки энергии таких пучков. Установлено, что азимутальная функция существенно влияет на свойства поперечных потоков энергии пучка.

Ключевые слова: параксиальные пучки, векторные циркулярные пучки, пучки Куммера.

Для цитирования: Гиргель, С.С. Энергетические характеристики векторных циркулярных пучков Куммера конечной мощности. I. Однородная поляризация / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 16–20. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_16. – EDN: ETJLTU

Abstract. Analytical expressions in the closed shape for the vector circular 3D light Kummer beams with the homogeneous polarisation are offered and explored. These expressions do not contain a Gaussian. At certain restrictions on the free parameters such Kummer beams transfer terminating power. The transverse (spin and orbital) energy fluxes of such beams are calculated and graphically studied. It has been established, that the azimuthal function essentially influences the properties of transverse beam energy fluxes.

Keywords: paraxial beams, vector circular beams, Kummer beams.

For citation: Girgel, S.S. Energy properties of the vector circular kummer beams with terminating power. I. The homogeneous polarization / S.S. Girgel // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 16–20. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_16 (in Russian). – EDN: ETJLTU

Введение

Чтобы охарактеризовать параксиальные световые пучки, как правило, [1]–[3] применяют аподизацию соответствующей амплитуды пучка функцией Гаусса. Тогда амплитудная функция, описывающая такой пучок, будет квадратично интегрируемой и поэтому такой параксиальный пучок будет обладать конечной мощностью. Таковы, например, хорошо изученные пучки Гаусса, Бесселя – Гаусса, Эрмита – Гаусса, Лагерра – Гаусса и т. д. Однако наличие гауссиана в комплексной амплитуде параксиального пучка совсем не обязательно. Нами в работе [4] было найдено новое решение параксиального волнового уравнения в декартовой системе координат. Это решение содержит функцию Куммера и не имеет гауссиана. Однако такие декартовы пучки Куммера обладают конечной переносимой мощностью при определенных найденных ограничениях, накладываемых на их свободные параметры. В [5] этот формализм был распространен на

скалярные решения 3D параксиального волнового уравнения в цилиндрических координатах и получены решения, описывающие скалярные циркулярные пучки Куммера. Установлены также условия их физической реализуемости. В [6] этот подход был распространен на векторные пучки Куммера в декартовой системе координат.

В настоящей работе этот формализм распространяется на новые векторные решения параболического уравнения в цилиндрической системе координат. Получены выражения, описывающие векторные циркулярные 3D световые пучки Куммера с непрерывным комплексным индексом ν и конечной мощностью. Обсуждаются поляризационные и энергетические свойства таких пучков.

1 Циркулярные 3D пучки Куммера

Скалярное параксиальное уравнение, характеризующее скалярную амплитуду f параксиальных световых пучков для монохроматических

волн вида $f(\mathbf{r}, t) = f \exp(-i\omega t)$, можно записать в форме [2]

$$(\nabla_{\perp}^2 + 2ik\partial_z)f = 0, \quad (1.1)$$

где $k_0 = \omega/c$; $k = k_0 n$.

В работах [7], [5] (смотри также [8]) нами было показано, что уравнение (1.1) в цилиндрических безразмерных координатах (R, φ, Z) , где безразмерный радиус $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$, имеет решения

$$f = R^m \left(\frac{Q(Z)}{Q(0)} \right)^{\nu} M \left(-\nu, m+1; i \frac{R^2}{Q} \right) \cdot f_2(\varphi) = f_R(R) \cdot f_2(\varphi), \quad (1.2)$$

описывающие скалярные циркулярные пучки с цилиндрической симметрией. Здесь $\varphi = \text{arctg}(Y/X)$, $X = x/x_0$, $Y = y/x_0$, $Z = z/z_0$. x_0 и $z_0 = kx_0^2/2$ – некоторые характерные вещественные размеры пучка в направлениях, параллельных осям OX и OY соответственно. M – функция Куммера, или, иначе, вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1$ [9], [10]. Q – введенный безразмерный комплексный параметр пучка: $Q = Z - Q_0$, причем $Q_0 = Q'_0 + iQ''_0$. Здесь и далее штрихами помечаем вещественные и мнимые части различных величин. Фазовый множитель f_2 можно записать в общем виде, как $f_2(m, \varphi) = \cos m\varphi + ib \sin m\varphi$, где $b \in [0; 1]$ – азимутальный параметр модуляции.

Чтобы параксиальные пучки (1.2) переносили конечную мощность, необходимо, чтобы для функции f выполнялись условия её квадратичной интегрируемости (КИ). В [6] были установлены условия КИ, Необходимое условие – это ограничение на мнимую часть комплексного свободного параметра Q_0 : $Q''_0 > 0$. Кроме того, на второй свободный комплексный параметр $\nu = \nu' + i\nu''$ также накладываются ограничения $\nu = -m - N$, которые соответствуют варианту 1 в таблице 1 [5] ($m = 0, 1, 2, \dots$; $Q''_0 > 0$; $N = 1, 2, 3, \dots$). Возможен также другой вариант 2.4 условий КИ в таблице 1:

$$Q''_0 > 0 \cup \nu' < -(1+m)/2 \quad (1.3)$$

Несложно проверить, что ограничение 1 является частным случаем ограничения 2.4. Поэтому далее мы будем использовать только условие КИ (1.3).

Существенно также то, что выражение (1.2) для амплитуды пучка не содержит явно гауссиана, но, тем не менее, при ограничениях (1.3) параксиальные пучки Куммера обладают конечной мощностью.

В настоящей работе использованный нами формализм [4]–[7] далее обобщается на 3D векторные циркулярные пучки Куммера.

2 Векторные циркулярные пучки Куммера конечной мощности

Перейдем от скалярных к векторным циркулярным пучкам Куммера. Векторную амплитуду электрического поля \mathbf{E} любого параксиального светового пучка можно представить в форме $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\perp} + \mathbf{e}_z E_z$.

Рассмотрим, для начала, физические свойства векторных циркулярных пучков Куммера конечной мощности с однородной (одинаковой по поперечному сечению пучка) поляризацией. Представим поперечную часть векторной амплитуды \mathbf{E} параксиального пучка в форме $\mathbf{E}_{\perp} = \mathbf{e}_{\perp} f$, где f является некоторым решением параксиального параболического уравнения (1.1). Комплексный постоянный нормированный ($|\mathbf{e}_{\perp}|^2 = 1$) вектор поляризации \mathbf{e}_{\perp} не зависит от координат (x, y) . Для описания поляризационных характеристик пучка вектор \mathbf{e}_{\perp} можно разложить по циркулярному базису $(\mathbf{e}_{\rho}, \mathbf{e}_{\varphi}, \mathbf{e}_z)$:

$$\mathbf{e}_{\perp} = (\eta_{\rho} \mathbf{e}_{\rho} + \eta_{\varphi} \mathbf{e}_{\varphi}).$$

Можно ввести, согласно Ф.И. Фёдорову [11], в декартовой системе координат комплексный угол ψ выражением

$$\eta = E_y / E_x = \text{tg}(\psi' + i\psi''),$$

тогда азимут световой волны равен ψ' , а ее эллиптичность γ выражается как $\gamma = \text{th} \psi''$. Следуя этому формализму введем отношение $\eta_c = E_{\rho} / E_{\varphi} = \text{tg}(\psi_c' + i\psi_c'')$, тогда азимут главной оси эллипса поляризации световой волны равен $(\varphi + \psi')$, а ее эллиптичность γ будет

$$\gamma = \text{th} \psi_c'' = \text{Im}(\text{arctg}(E_{\varphi} / E_{\rho})).$$

Так как векторный параметр поляризации $\mathbf{e}_{\perp} = \text{const}$, то поляризация будет фиксированной по всему сечению пучка, т. е. однородной.

Полные векторы электрического и магнитного полей векторного, однородно поляризованного, параксиального пучка можно выразить через \mathbf{E}_{\perp} [6]:

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_{\perp} f + \frac{i}{k} \nabla_{\perp} \mathbf{e}_{\perp} f \cdot \mathbf{e}_z;$$

$$\mathbf{H} = \frac{\varepsilon}{n} \left([\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{\perp}] f + \frac{i}{k} \nabla_{\perp} [\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{\perp}] f \right).$$

Далее физические характеристики векторных параксиальных пучков будем выражать в безразмерных переменных

$$\{ X = x/x_0, Y = y/x_0, Z = z/z_0, R = \sqrt{X^2 + Y^2} \}.$$

Двумерный оператор набла в безразмерных циркулярных (цилиндрических) координатах имеет вид $\nabla_2 = \mathbf{e}_R \partial_R + (1/R) \mathbf{e}_{\varphi} \partial_{\varphi}$. Переход к безразмерным переменным и параметрам не изменяет базовые векторы $\{\mathbf{e}_R, \mathbf{e}_{\varphi}, \mathbf{e}_z\}$. Возникают только

коэффициенты связи. Поэтому векторы электрического поля параксиального пучка

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_\perp f + \theta \nabla_\perp \mathbf{e}_\perp f \cdot \mathbf{e}_z.$$

Усредненные по времени плотности энергии w , продольного S_z и поперечного \mathbf{S}_\perp потоков энергии электромагнитного поля для параксиальных векторных пучков с однородной поляризацией в безразмерных переменных можно представить как [7], [6]:

$$w = \frac{\varepsilon |f|^2}{8\pi}; \quad S_z = \frac{c}{n} w;$$

$$\mathbf{S}_\perp = \mathbf{S}_o + \mathbf{S}_s = \theta S_z \cdot \left[\operatorname{Im} \left(\frac{\nabla_\perp f}{f} \right) + \theta \operatorname{th} 2\psi'' \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\nabla_\perp f}{f} \right) \cdot \mathbf{e}_z \right] \right]. \quad (2.1)$$

В выражении для \mathbf{S}_\perp выделены явно, по схеме Берри и Бекшаева [12]–[14], плотность орбитального \mathbf{S}_o и спинового \mathbf{S}_s потоков энергии. Здесь введен также коэффициент связи – безразмерный параметр параксиальности пучка $\theta = 1/(kx_0) \cong 10^{-4}$. Для параксиальных пучков $|\mathbf{S}_\perp / S_z| \ll 1$ вследствие присутствия малого параметра θ .

Формализм (2.1), разумеется, применим также к векторным паораксиальным пучкам Куммера. Преобразуя (2.1), находим, что плотности орбитального и спинового потоков энергии светового поля для параксиальных векторных световых пучков Куммера с однородной поляризацией равны

$$\mathbf{S}_o = \theta S_z \cdot \operatorname{Im}(a_R \mathbf{e}_R + a_\phi \mathbf{e}_\phi);$$

$$\mathbf{S}_s = \theta S_z \cdot \operatorname{Re}(a_\phi \mathbf{e}_R - a_R \mathbf{e}_\phi) \cdot \operatorname{th} 2\psi'',$$

где введены, для краткости, обозначения

$$a_R = \frac{\partial_R f_R}{f_R}; \quad a_\phi = \frac{\partial_\phi f_2}{R f_2}.$$

Для рассматриваемых параксиальных векторных циркулярных световых пучков Куммера с однородной поляризацией, например, комплексный параметр

$$a_R = \frac{m}{R} + \frac{-2iv R M(1-v, m+2; iR^2/Q)}{M(-v, m+1; iR^2/Q)}.$$

Здесь при расчете использованы преобразования Куммера $\partial_u M(a, b, u) = \frac{a}{b} M(a+1, b+1, u)$ [9] для функции Куммера M .

Физические свойства векторных циркулярных пучков Куммера в значительной степени зависят от азимутальной функции $f_2(\phi)$.

А) Пусть имеем круговую азимутальную зависимость $f_2 = \exp(i(m\phi))$. Тогда $a_\phi = im/R$ и выражения для плотностей продольного, орбитального и азимутального потоков энергии соот-

ветственно для векторных циркулярных пучков Куммера несколько упрощаются и принимают вид:

$$S_z = \frac{c\varepsilon |f_1(R)|^2}{8\pi n};$$

$$\mathbf{S}_o = \theta S_z \cdot (\mathbf{e}_R \operatorname{Im} a_R + \mathbf{e}_\phi m/R);$$

$$\mathbf{S}_s = -\theta S_z \cdot \operatorname{th} 2\psi'' \operatorname{Re}(a_R) \cdot \mathbf{e}_\phi.$$

Видим, что поперечный спиновый поток энергии направлен строго азимутально. Орбитальный поток энергии имеет азимутальную и радиальную составляющие. При возрастании радиальная компонента становится преобладающей.

Б) Пусть имеем явную азимутальную зависимость пучка в форме $f_2 = \cos(m\phi)$. Тогда $a_\phi = -m \operatorname{tg}(m\phi)/R$ и выражения для плотностей продольного, орбитального и азимутального потоков энергии соответственно для исследуемых пучков Куммера принимают вид:

$$S_z = \frac{c\varepsilon |f_1(R)|^2 \cos^2(m\phi)}{8\pi n};$$

$$\mathbf{S}_o = \theta S_z \cdot \mathbf{e}_R \operatorname{Im}(a_R);$$

$$\mathbf{S}_s = \theta S_z \cdot \operatorname{th} 2\psi'' (a_\phi \mathbf{e}_R - \operatorname{Re}(a_R) \cdot \mathbf{e}_\phi).$$

В противоположность предыдущему случаю уже поперечный орбитальный поток энергии направлен строго радиально. Спиновый же поток энергии имеет азимутальную и радиальную составляющие. При возрастании R постепенно азимутальная компонента вектора \mathbf{S}_s становится преобладающей.

3 Графическое моделирование картин потоков энергии векторных циркулярных пучков Куммера непрерывного индекса ν с конечной энергией

Нами проводилось аналитическое и графическое исследование потоков энергии векторных циркулярных пучков Куммера. Во всех случаях $m=1$; $Q_0''=0,02$; $\nu'=-1,1$; $\nu''=0$; $Z=0,8$; $\operatorname{th} 2\psi''=1$. Взят, для простоты, азимутальный параметр модуляции $b=1$. На всех рисунках масштаб интенсивности условный.

А) Азимутальная зависимость $f_2 = \exp(i(m\phi))$.

Картинки интенсивности потока \mathbf{S}_o представляют собой кольца (рисунок 3.1, б), число и характер которых зависит, главным образом, от свободного параметра Q_0'' . При малых значениях параметра Q_0'' вокруг главного кольца появляются небольшие дополнительные кольца, которые возрастают с увеличением Z (рисунки 3.2, в и 3.2, б). При $Q_0'' \rightarrow 0$ ясно видно (рисунки 3.2, б и 3.2, в) бесконечное число колец. При возрастании ширина колец интенсивности растет и изменяется их интенсивность. При $m > 0$ имеем полые пучки

Куммера. При $m=0$ дополнительно к кольцам появляется центральный пик. При возрастании мнимой части ν'' параметра ν пучок расширяется, при уменьшении сужается, при этом качественно характер картины интенсивности не меняется. При возрастании расстояния Z пучок и картины интенсивности постепенно расширяются. При уменьшении ν' максимумы интенсивностей колец начинают возрастать и нули функции f исчезают.

Спиновые же потоки энергии направлены строго азимутально (рисунки 3.2, а и 3.2, б), картины интенсивности которых представляют собой также кольца. Картины интенсивности спиновых потоков S_s (рисунок 3.1, б) сильно

коррелируют с картинами полной интенсивности пучка (рисунок 3.1, в). Характерные особенности потоков S_s – их направления периодически изменяются на противоположные при переходах через области минимума интенсивности (рисунки 3.2, а и 3.2, б). На рисунке 3.2, в, представлена картина полной интенсивности пучков Куммера непрерывного комплексного индекса ν . Поскольку график интенсивности пучка не зависит от азимута, на рисунке 3.2, с, изображены только сечения пучка вдоль оси Z . Видно, что картины интенсивности потоков S_s слабо коррелируют с распределением полной интенсивности пучка.

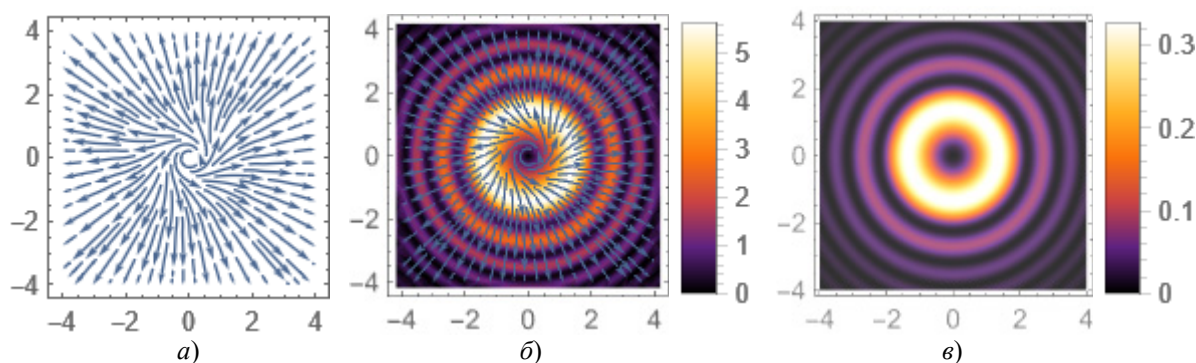


Рисунок 3.1 – Орбитальный поток энергии векторных циркулярных пучков Куммера с зависимостью $f_2 = \exp(i(m\varphi))$: а) только линии потока; б) линии потока вместе с его интенсивностью; в) полная интенсивность светового пучка Куммера

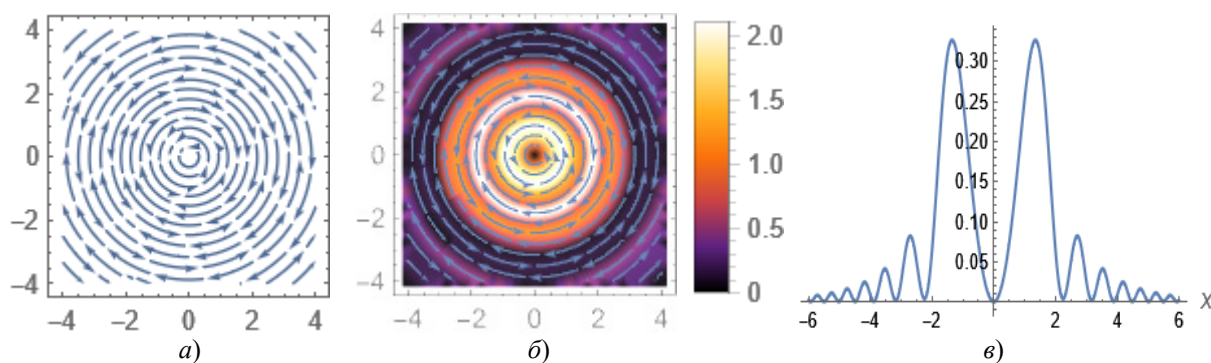


Рисунок 3.2 – Спиновый поток энергии векторных циркулярных пучков Куммера с зависимостью $f_2 = \exp(i(m\varphi))$: а) только линии потока; б) линии потока вместе с его интенсивностью; в) сечение картины полной интенсивности циркулярного пучка Куммера

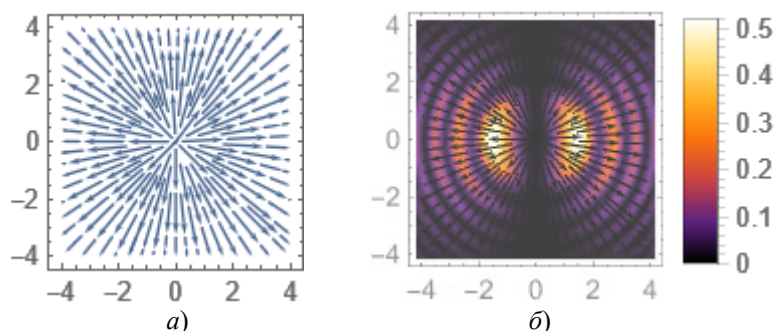


Рисунок 3.3 – Орбитальный поток энергии векторных циркулярных пучков Куммера с зависимостью $f_2 = \cos(m\varphi)$: а) только линии потока; б) линии потока вместе с его интенсивностью

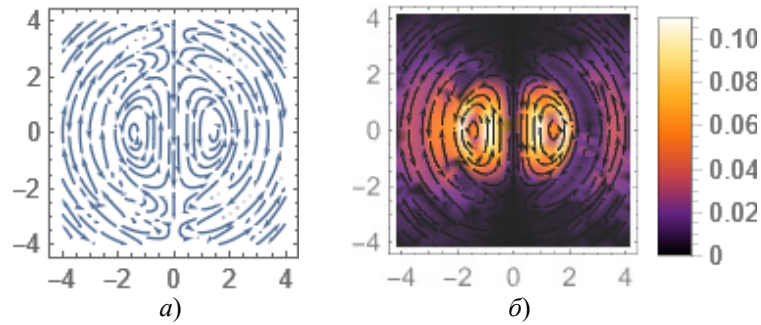


Рисунок 3.4 – Спиновый поток энергии векторных циркулярных пучков Куммера с зависимостью $f_2 = \cos(m\varphi)$: а) только линии потока; б) линии потока вместе с его интенсивностью

Б) Азимутальная зависимость пучка $f_2 = \cos(\varphi)$. Изменение азимутальной функции $\exp(i(\varphi))$ на $\cos(\varphi)$ приводит к радикальному изменению поперечных потоков энергии и их интенсивности. На рисунках 3.3 и 3.4 видно, что орбитальные потоки энергии S_o в таких случаях всегда направлены вдоль радиусов R , а картины их интенсивности представляют собой также кольца, которые частично коррелируют с общей интенсивностью пучка. Наиболее интересны картины спинового потока энергии S_s пучков Куммера с азимутальной зависимостью $\cos(\varphi)$ (рисунки 3.4, а и 3.4, б). Спиновые потоки энергии разделены на две области плоскостью YZ . В каждой области спиновые потоки энергии независимы и представляют собой замкнутые кривые. Однако плоскость YZ не является плоскостью симметрии, поскольку направления вращения спиновых потоков S_s являются одинаковыми. Они изменяются на противоположные при изменении знака параметра поляризации $\text{th } 2\psi$.

Заключение

В данной работе выведены выражения, описывающие новые типы пучков – векторные параксиальные циркулярные световые пучки Куммера с непрерывным комплексным индексом ν , переносящие конечную мощность и поэтому физически реализуемые. Они характеризуются четырьмя свободными параметрами: двумя вещественными – (b, m) и двумя комплексными параметрами (Q_0, ν) .

Сформулированы условия физической реализуемости новых векторных пучков Куммера с переносимой конечной мощностью во всем пространстве. Выполнено графическое моделирование их потоков энергии и интенсивности. Проведен соответствующий анализ. Установлено, что выбор различных азимутальных функций пучка приводит к качественно различным физическим следствиям.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ананьев, Ю.А.* Оптические резонаторы и лазерные пучки / Ю.А. Ананьев. – Москва: Наука, 1990. – 264 с.

2. *Абрамочкин, Е.Г.* Современная оптика гауссовых пучков / Е.Г. Абрамочкин, В.Г. Волостников. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 184 с.

3. *Gori, F.* Bessel-Gaussian beams / F. Gori, G. Guattari, C. Padovani // *Opt. Commun.* – 1987. – Vol. 64. – P. 491–495.

4. *Гиргель, С.С.* Пучки Куммера без гауссовой аподизации с переносимой конечной мощностью / С.С. Гиргель // *Проблемы, физики, математики и техники.* – 2015. – № 3 (24). – С. 7–9.

5. *Гиргель, С.С.* 3D световые пучки Куммера без гауссовой аподизации с переносимой конечной мощностью / С.С. Гиргель // *Проблемы, физики, математики и техники.* – 2022. – № 2 (52). – С. 18–21.

6. *Гиргель, С.С.* Энергетические характеристики векторных декартовых пучков Куммера с переносимой конечной мощностью / С.С. Гиргель // *Проблемы, физики, математики и техники.* – 2022. – № 3 (53). – С. 13–17.

7. *Гиргель, С.С.* Циркулярные 3D световые пучки Куммера – Гаусса с непрерывным угловым спектром // С.С. Гиргель / *Проблемы физики, математики и техники.* – 2019. – № 1 (38). – С. 16–20.

8. *Bandres, Miguel A.* Circular beams / Miguel A. Bandres and Julio C. Gutierrez-Vega // *Optics Letters.* – 2008. – Vol. 33, № 2. – P. 177–179.

9. *Справочник по специальным функциям* / под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – Москва: Наука, 1979. – 830 с.

10. *Янке, Е.* Специальные функции / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – Москва: Наука, 1977. – 342 с.

11. *Федоров, Ф.И.* Оптика анизотропных сред / Ф.И. Федоров. – Минск: Изд-во АН БССР, 1976. – 380 с.

12. *Berry, M.V.* Optical currents / M.V. Berry // *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics.* – 2009. – Vol. 11 (9). – P. 094001.

13. *Bekshaev, A.Y.* Transverse energy flows in vectorial fields of paraxial beams with singularities / A.Y. Bekshaev, M.S. Soskin // *Optics Communications.* – 2007. – Vol. 271. – P. 332–348.

14. *Bekshaev, A.* Internal flows and energy circulation in light beams / A. Bekshaev, K. Bliokh, M. Soskin // *Journal of Optics.* – 2011. – Vol. 13 (5). – P. 053001.

Поступила в редакцию 24.06.2022.

Информация об авторах

Гиргель Сергей Сергеевич – д.ф.-м.н., профессор

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ АНТИСТАТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

К.Д. Данильченко¹, А.А. Маевский¹, А.В. Семченко¹, В.В. Сидский¹,
В.В. Васькевич¹, В.Е. Гайшун¹, Д.Л. Коваленко¹, О.И. Тюленкова¹, Н.В. Насонова²

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск

STUDY OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF COMPOSITE ANTISTATIC COATINGS SYNTHETIZED BY SOL-GEL METHOD

K.D. Danilchenko¹, A.A. Maevsky¹, A.V. Semchenko¹, V.V. Sidski¹,
V.V. Vaskevich¹, V.E. Gaishun¹, D.L. Kovalenko¹, O.I. Tyulenkova¹, N.V. Nasonova²

¹Francisk Skorina Gomel State University

²Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk

Аннотация. Разработаны составы и определены способы формирования золь-гель методом композиционных антистатических покрытий различного состава, обладающих высокими оптическими, адгезионными и механическими характеристиками, для модификации конструкционных материалов, используемых в приборостроении. Проведены исследования механических, оптических и электрофизических свойств полученных покрытий. Все полученные покрытия обладают коэффициентом пропускания 75–85% в видимом и ближнем ИК-диапазонах (400–800 нм), обладают высокой механической твердостью до 5 Н. Лучшей электропроводностью характеризуются образцы состава FTO.

Ключевые слова: композиционные антистатические покрытия, золь-гель метод, термообработка, твердость, оптические свойства, электрофизические свойства.

Для цитирования: Исследование физических свойств композиционных антистатических покрытий, синтезированных золь-гель методом / К.Д. Данильченко, А.А. Маевский, А.В. Семченко, В.В. Сидский, В.В. Васькевич, В.Е. Гайшун, Д.Л. Коваленко, О.И. Тюленкова, Н.В. Насонова // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 21–24. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_21. – EDN: GGGCSZ

Abstract. The compositions have been developed and the methods for the formation of composite antistatic coatings of various compositions with high optical, adhesive and mechanical characteristics for the modification of structural materials used in instrumentation by sol-gel method have been determined. The studies of the mechanical, optical and electrophysical properties of the obtained coatings have been carried out. All obtained coatings have transmittance of 75–85% in the visible and near-infrared ranges (400–800 nm), high mechanical hardness up to 5 N. The samples of the FTO composition are characterized by the best electrical conductivity.

Keywords: composite antistatic coatings, sol-gel method, heat treatment, hardness, optical properties, electrophysical properties.

For citation: Study of the physical properties of composite antistatic coatings synthesized by sol-gel method / K.D. Danilchenko, A.A. Maevsky, A.V. Semchenko, V.V. Sidski, V.V. Vaskevich, V.E. Gaishun, D.L. Kovalenko, O.I. Tyulenkova, N.V. Nasonova // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 21–24. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_21 (in Russian). – EDN: GGGCSZ

Введение

Одной из причин выхода техники из строя является образование статического электричества. Электростатические разряды способны полностью вывести электронные блоки управления из рабочего состояния. При нанесении на подложки антистатических покрытий электростатический заряд снижается. Этот факт вызывает интерес к условно проводящим покрытиям, которые сочетают антистатические свойства с повышенной стойкостью к царапинам и механическим воздействиям [1]–[3].

Одним из перспективных методов синтеза композиционных антистатических покрытий является золь-гель метод, который используется для нанесения различных нанокomпозитных покрытий на разные подложки. Золь-гель метод не требует дорогостоящего оборудования, а также позволяет получать тонкие пленки с различными функциональными свойствами при относительно низких температурах [4].

Для защиты от статического электричества предполагается использование следующих условно проводящих покрытий: ITO, FTO, ZnO : Al, ZnO : Cu, ZnO : Ag.

1 Методика эксперимента

Для установления физических свойств композиционных антистатических покрытий, была изготовлена серия образцов с различным составом (ITO, FTO, ZnO : Al, ZnO : Cu, ZnO : Ag).

Гидролиз растворов для получения образцов проводили в водно-спиртовой среде, в качестве растворителей использовали этиловый спирт. Для полного созревания растворы выдерживали при температуре окружающей среды (22 ± 2)° C в течение 2–3 суток.

Золь наносили методом центрифугирования на установке Arogee See 200X с частотой вращения 2500 об/мин. В качестве подложки использовали оптически прозрачное фотостекло. Затем подложки помещали в вакуумную печь и проводили отжиг при различных температурах. Подложки в печи разогревали до 450° C, 500° C, 550° C в течении 0, 5, 10 минут (скорость нагрева $\approx 3,3$ ° C в мин.), после отжига подложки с покрытием охлаждали в течении 10–15 минут. После термообработки и остывания подложки извлекали из печи и помещали в специальные пластиковые контейнеры для дальнейшего перемещения и исследования их свойств.

Исследование механических свойств полученных покрытий (твёрдость покрытий) провели с помощью прибора для определения твёрдости «Константа ТК» производства РФ.

Метод измерения состоит в механическом воздействии на покрытие графитовым стержнем, заточенным специальным образом, и последующим визуальным определением разрушения покрытия. Карандаш с варьируемой твёрдостью с фиксированным нажимом 7,6 Н под углом 45° к поверхности.

Для определения оптических свойств проводящих образцов использовали спектрофотометр Cary 50. Производства США.

Методика измерения состоит в том, что для разложения излучения в спектр в приборах используется монохроматор с дифракционной решёткой. В качестве источников излучения используются ксеноновая, галогенная, дейтериевая лампа, а в качестве приемника – фотодиод. Программное обеспечение спектрофотометра позволяет управлять установкой параметров прибора, осуществлять расчёт концентрации компонента в пробе на основе измерений её оптической плотности и хранить результаты измерений.

Измерение удельного электрического сопротивления проводящих слоёв полупроводниковых материалов четырехзондовым методом проводилось на промышленной установке ИУС-3 производства РФ. Данная установка позволяет проводить измерения высокой точности, согласно стандартам ASTM F 84, F 43.

Принцип работы прибора заключается в измерении удельного электрического сопротивления четырехзондовым методом, при котором

цифровой вольтметр регистрирует сигнал, равный среднему значению слоевого сопротивления R_s . Слоевое сопротивление в нём измеряется с точностью 2% при толщине более 5 мкм.

2 Результаты и их обсуждение

Механическая прочность. Антистатические покрытия должны обладать высокой адгезионной устойчивостью. Уровень твёрдости полученных покрытий показан в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Результаты измерения твёрдости полученных образцов

№ Образца	Состав образца	Температура отжига	Время отжига	Степень твёрдости
1	FTO (1 слой)	450° C	5 мин	5Н
2	FTO (1 слой)	550° C	5 мин	5Н
3	FTO (1 слой)	550° C	10 мин	2Н
4	FTO (1 слой)	450° C	10 мин	5Н
5	FTO (1 слой)	500° C	10 мин	5Н
6	FTO (1 слой)	550° C	15 мин	5Н
7	FTO (2 слоя)	450° C	10 мин	5Н
8	FTO (2 слоя)	500° C	10 мин	5Н
9	FTO (2 слоя)	550° C	10 мин	5Н
10	FTO (4 слоя)	550° C	5 мин	3Н
11	FTO (8 слоёв)	550° C	5 мин	2Н
12	ITO (6 слоёв)	550° C	5 мин	5Н
13	ZnO : Cu (1 слой)	550° C	5 мин	5Н
14	ZnO : Ag (1 слой)	550° C	5 мин	5Н
15	ZnO : Al (1 слой)	550° C	5 мин	5Н

Из приведенной выше таблицы 2.1 видно, что с возрастанием количества циклов нанесения свыше 4–6 механическая твердость тонких композиционных антистатических пленок FTO снижается. Твердость образцов состава ITO с возрастанием числа слоев не меняется. Дополнительный термический вакуумный отжиг также не влияет на твёрдость образца.

Оптические свойства. Пленки составов ITO, FTO, ZnO : Al, ZnO : Cu, ZnO : Ag, нанесенные на подложки из стекла, исследовали в спектральной области 300–1200 нм на спектрофотометре

Сary 50. Композиционные антистатические покрытия имеют практически одинаковый характер спектров пропускания в зависимости от толщины пленки. Для примера на рисунке 2.1 представлены спектры оптического пропускания (T) пленок ИТО, нанесенных на стеклянную подложку, содержащие разное количества слоев, отожженных при различных температурах.

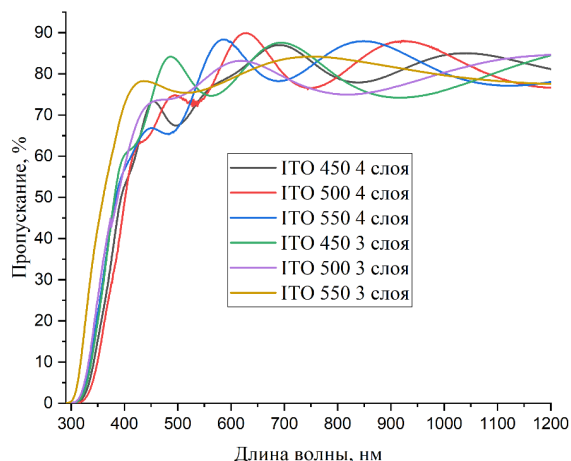


Рисунок 2.1 – Оптические свойства образцов ИТО

Пленки ИТО, нанесенные на стекло, обладают хорошим коэффициентом пропускания (75–85%) в видимом и ближнем ИК диапазоне. Более длительный отжиг при 550° С приводит к незначительному смещению края полосы фундаментального поглощения в коротковолновую сторону за счет уплотнения пленки и совершенствования ее кристаллической структуры. Также спектры пропускания имеют осциллирующий характер, характерный для возникающих интерференционных эффектов в многослойных тонкопленочных структурах.

Электрофизические свойства. В таблице 2.2 показано поверхностное удельное сопротивление различных покрытий в зависимости от параметров их изготовления (температуры отжига и количества слоев).

Из таблицы видно, что для образцов FTO № 1–3 удельное сопротивление уменьшается с увеличением времени отжига при нанесении покрытия. Это может быть связано с уплотнением слоев при более длительном отжиге, что ведет к большей подвижности зарядов.

Образцы FTO № 4–6 характеризуются увеличением проводимости при увеличении температуры отжига, однако образцы № 5–6 не имеют статистически значимые отличные друг от друга характеристики. Данный результат можно объяснить выходом изменения сопротивления на температурное плато при увеличении температуры отжига до определенного уровня. Следует отметить, что данный результат относится к одному нанесенному слою покрытия, поскольку

нет корреляции с теми же температурными режимами при нанесении двух и более слоев.

Таблица 2.2 – Результаты измерения удельного сопротивления полученных образцов

№ Образца	Состав образца	Температура отжига	Время отжига	Поверхностное удельное сопротивление, Ом /□
1	FTO (1 слой)	450° С	5 мин	$75 \cdot 10^4$
2	FTO (1 слой)	550° С	5 мин	$19 \cdot 10^4$
3	FTO (1 слой)	550° С	10 мин	$14 \cdot 10^3$
4	FTO (1 слой)	450° С	10 мин	$3 \cdot 10^6$
5	FTO (1 слой)	500° С	10 мин	$97 \cdot 10^3$
6	FTO (1 слой)	550° С	15 мин	$98 \cdot 10^3$
7	FTO (2 слоя)	450° С	10 мин	$41 \cdot 10^5$
8	FTO (2 слоя)	500° С	10 мин	$53 \cdot 10^4$
9	FTO (2 слоя)	550° С	10 мин	$22 \cdot 10^4$
10	FTO (4 слоя)	550° С	5 мин	$63 \cdot 10^3$
11	FTO (8 слоёв)	550° С	5 мин	$7 \cdot 10^3$
12	ИТО (6 слоёв)	550° С	5 мин	$16 \cdot 10^4$ (после дополнительного термического отжига $8 \cdot 10^3$)
13	ZnO : Cu (1 слой)	550° С	5 мин	$1,57 \cdot 10^9$
14	ZnO : Ag (1 слой)	550° С	5 мин	$2,28 \cdot 10^8$
15	ZnO : Al (1 слой)	550° С	5 мин	$85 \cdot 10^4$

Образцы № 7–9 показывают снижение сопротивления при повышении температурного режима обработки до больших значений по сравнению с серией образцов № 4–6. Отслеживается тенденция к резкому увеличению проводимости при повышении температурного режима с 450° С на 500° С, однако падение сопротивления продолжается при повышении температуры с 500° С до 550° С. Вероятно, данное продолжение падения сопротивления связано с большим уплотнением слоев при повышении температуры

и уменьшением их пористости, что подтверждается данными для образцов № 10–11 FTO, которые показывают дальнейшее снижение сопротивления при уплотнении большего количества слоев при том же температурном режиме обработки.

Для сравнения, исследованные и описанные ранее [5] покрытия на основе ZnO, легированные ионами Cu, Ag, Al, уступают по электропроводящим свойствам пленкам FTO, приведенным выше. Также пленки этого состава превосходят по электрофизическим характеристикам пленки ITO, синтезированные аналогичным методом, не уступая им по механическим и оптическим характеристикам. После дополнительного термического отжига наблюдается уменьшение поверхностного удельного сопротивления до $8 \cdot 10^3$ Ом/□. Дополнительный отжиг в вакууме при температуре 350°С приводит к уплотнению пленки, и как следствие уменьшению поверхностного удельного сопротивления.

Заключение

Исследованы физические свойства композиционных антистатических золь-гель покрытий различного состава. Проведены измерения механической прочности полученных образцов с использованием твердомера «Константа ТК». Установлено, что твердость полученных растворов изменяется в диапазоне от 2Н до 5Н в зависимости от времени и температуры отжига. Дополнительный термический вакуумный отжиг не влияет на оптические свойства и твердость образца ITO. Все композиционные антистатические покрытия имеют практически одинаковый характер спектров пропускания в зависимости от толщины пленки. Обладают хорошим коэффициентом пропускания (75–85%) в видимом и ближнем ИК диапазоне. Более длительный отжиг при 550°С приводит к незначительному смещению края полосы фундаментального поглощения в коротковолновую сторону за счет уплотнения пленки и совершенствования ее кристаллической структуры. Также спектры пропускания имеют осциллирующий характер, характерный для возникающих интерференционных эффектов в многослойных тонкопленочных структурах.

Показано, что дополнительный термический отжиг влияет на удельное поверхностное сопротивление образца ITO. Наблюдается уменьшение поверхностного удельного сопротивления с $16 \cdot 10^4$ до $8 \cdot 10^3$ Ом/□. Можно предположить, что этот эффект связан с уплотнением пленки, после отжига в вакууме при температуре 350°С, а также с улучшением кристаллической структуры пленок. Таким образом необходимо провести дополнительные исследования образцов с различным составом (FTO, ZnO:Al, ZnO:Cu, ZnO:Ag), влияние дополнительного

вакуумного отжига на механические, структурные и электрофизические свойства полученных образцов.

Электрофизические свойства полученных покрытий соответствуют требованиям, предъявляемым к антистатическим покрытиям, что позволит им в этом качестве конкурировать с более дорогими в изготовлении прозрачными проводящими покрытиями с использованием вакуумных технологий.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Dry and wet sliding wear of ITO-coated PET components used in flexible optoelectronic applications* / K.A. Sierros [et al.] // *Wear.* – 2009. – Vol. 267. – P. 625–631.
2. *MuraliBabu, B. High performance humidity sensing properties of indium tin oxide (ITO) thin films by sol-gel spin coating method* / B. MuraliBabu, S. Vadivel // *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* – 2017. – Vol. 28. – P. 2442–2447.
3. *Comparison of the dye-sensitized solar cells performances based on transparent conductive ITO and FTO* / C. Sima [et al.] // *Thin Silid Films.* – 2010. – Vol. 519. – P. 595–597
4. *Lasorsa, C.A. Protective Si_xO_yC_z coatings on steel prepared by plasma activated chemical vapour deposition* / C.A. Lasorsa, P.M. Perillo, P.J. Morando // *Surface and Coatings Technology.* – 2010. – Vol. 204, № 16 / 17. – P. 2813–2816.
5. *Влияние дополнительного отжига в вакууме на структуру, электрические и оптические свойства ZnO : Al пленок, синтезированных золь-гель методом* / В.В. Сидский [и др.] // *Проблемы физики, математики и техники.* – 2018. – Vol. 37, № 4. – С. 44–46.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ №Т21АРМГ-004 от 15 июля 2021 г.) и Национального политехнического университета Армении, Ереван, Армения (AR-FRBCF-2020-2021).

Поступила в редакцию 20.09.2022.

Информация об авторах

*Данильченко Константин Дмитриевич – мл. науч. сотрудник
Маевский Александр Артурович – мл. науч. сотрудник
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Сидский Виталий Валерьевич – к.т. н., доцент
Васькевич Василий Васильевич – ст. преподаватель
Гайшун Владимир Евгеньевич – к.ф.-м.н., доцент
Коваленко Дмитрий Леонидович – к.ф.-м.н., доцент
Тюленкова Ольга Ивановна – ст. науч. сотрудник
Насонова Наталья Викторовна – д.т.н., доцент*

УДК 530.1;536.7;544.2

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_25
EDN: HETCXZ**О ПРИВЕДЕННОЙ ФОРМЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
КОЭФФИЦИЕНТОВ РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ****Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков***Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины***ON THE REDUCED FORM OF THERMODYNAMIC
COEFFICIENTS OF REAL GASES****E.A. Dey, G.Yu. Tyumenkov***Francisk Skorina Gomel State University*

Аннотация. Предложена форма записи соотношений, определяющих физические параметры (термодинамические коэффициенты), на основании уравнений состояния реальных газов. Для каждого соотношения выделена основная безразмерная часть, выраженная через приведенные термодинамические переменные. Получен явный вид приведенных соотношений для уравнений состояния Ван-дер-Ваальса, Редлиха – Квонга и Соаве – Редлиха – Квонга. Построены графики коэффициентов в приведенных переменных.

Ключевые слова: термодинамический коэффициент, приведенные переменные, уравнение состояния реального газа, уравнение Ван-дер-Ваальса, уравнение Редлиха – Квонга, уравнение Соаве – Редлиха – Квонга.

Для цитирования: Дей, Е.А. О приведенной форме термодинамических коэффициентов реальных газов / Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 25–29. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_25 – EDN: HETCXZ

Abstract. A form of writing the relationships that determine the physical parameters (thermodynamic coefficients) based on the equations of state of real gases is proposed. For each ratio, the main dimensionless part, expressed in terms of the given thermodynamic variables, is singled out. An explicit form of the reduced relations for the van der Waals, Redlich – Kwong and Soave – Redlich – Kwong equations of state is obtained. The graphs of coefficients in the given variables are constructed.

Keywords: thermodynamic coefficient, reduced variables, equation of real gas state, van der Waals equation, Soave – Redlich – Kwong equation, Redlich – Kwong equation.

For citation: Dey, E.A. On the reduced form of thermodynamic coefficients of real gases / E.A. Dey, G.Yu. Tyumenkov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 25–29. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_25 (in Russian). – EDN: HETCXZ

Введение

Уравнения состояния реальных газов являются основой для теоретического и численного исследования их свойств [1]–[3]. Классический этап феноменологического конструирования уравнений состояния с использованием постоянных числовых параметров и подбором функционального поведения был связан с предложением большого количества вариантов уравнений, начиная с уравнения Ван-дер-Ваальса [1]–[3]. Осмысление структуры уравнения Редлиха – Квонга [4] как содержащей параметр, зависящий от температуры, привело к формулировке уравнения Соаве – Редлиха – Квонга [5], в котором был введен параметр, зависящий от безразмерной приведенной температуры $\alpha(\tilde{T})$. В последующие годы эта идея использования функционального параметра, входящего в состав уравнения состояния, была реализована в уравнении Пенга – Робинсона [6] и далее в большинстве предложенных новых вариантов уравнений.

В настоящее время поиск уравнений состояния реальных газов, наилучшим образом описывающих их свойства ведется, в основном, в двух направлениях:

- а) изучение новых вариантов функциональных параметров $\alpha(\tilde{T})$ [7];
- б) изменение формы существующих уравнений на основе тех или иных физических соображений [8], [9].

Одним из направлений теоретического исследования уравнений состояния и свойств реальных газов является использование безразмерных приведенных переменных, выражающих значения абсолютной температуры, объема и давления в единицах из критических значений

$$\tilde{P} = \frac{P}{P_{кр}}, \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_{кр}}, \quad \tilde{V} = \frac{V}{V_{кр}}. \quad (0.1)$$

Это позволяет получать результаты, общие для всех веществ, находящихся в термодинамических подобных состояниях, и в определенном

смысле развивать принцип соответственных состояний.

Описание уравнений и физических величин в приведенных переменных наиболее удобно, поскольку в силу принципа соответственных состояний теоретические результаты в рамках выбранного уравнения состояния являются общими для всех термодинамически подобных веществ [1]. Эффективность такого подхода основана на том, что результаты не связаны с конкретным веществом, а, скорее, характеризуют конкретное уравнение состояния.

В работах [9]–[11] приведенные термодинамические переменные были использованы для теоретического описания кривых инверсии эффекта Джоуля – Томсона и свойств перегретой жидкости на основе классических уравнений состояния. Косвенно использование приведенных термодинамических переменных стимулируется и тем, что все варианты альфа-функций, количество которых непрерывно растет, формулируются с применением приведенной температуры.

В данной работе приведенные термодинамические переменные используются для получения и анализа безразмерных выражений для некоторых физических величин, называемых обычно термодинамическими коэффициентами [1].

1 Приведенные термодинамические коэффициенты реальных газов

Термодинамические коэффициенты характеризуют тепловые и упругие свойства тел. Математическое определение изобарического коэффициента расширения, изохорного термического коэффициента давления и изотермического коэффициента сжимаемости имеет, соответственно, вид

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p, \quad \beta_V = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V, \quad k_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T. \quad (1.1)$$

В общем случае взаимосвязь между указанными коэффициентами получается с учетом соотношения $(\partial P / \partial V)_T (\partial V / \partial T)_P (\partial T / \partial P)_V = -1$, откуда, из определений коэффициентов (1.1), следует

$$\alpha_p = \beta_V k_T P. \quad (1.2)$$

Наряду с перечисленными коэффициентами удобно вычислить также разность изобарной и изохорной теплоемкостей газа, определяемую соотношением

$$\Delta c = c_p - c_V = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T^{-1}. \quad (1.3)$$

Выполним переход к приведенным переменным в определениях рассматриваемых

термодинамических коэффициентов (1.1). С учетом (0.1) получаем

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{T_{kp}} \tilde{\alpha}_p, \quad \tilde{\alpha}_p = \frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{P}} = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}, \quad \beta_V = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{T_{kp}} \tilde{\beta}_V, \quad \tilde{\beta}_V = \frac{1}{\tilde{P}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}}, \quad k_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{P_{kp}} \tilde{k}_T, \quad \tilde{k}_T = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{P}} \right)_{\tilde{T}} = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}, \quad \Delta c = \frac{P_{kp} V_{kp}}{T_{kp}} \Delta \tilde{c}, \quad \Delta \tilde{c} = -\tilde{T} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}}^2 \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}. \quad (1.4)$$

Соотношение (1.2) между коэффициентами в приведенной форме имеет вид $\tilde{\alpha}_p = \tilde{\beta}_V \tilde{k}_T \tilde{P}$.

2 Термодинамические коэффициенты в модели газа Ван-дер-Ваальса

Уравнение Ван-дер-Ваальса для одного моля реального газа имеет вид

$$\left(P + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT.$$

Параметры уравнения a, b связаны с параметрами критического состояния вещества соотношениями

$$V_{kp} = 3b, \quad P_{kp} = \frac{a}{27b^2}, \quad T_{kp} = \frac{8a}{27bR}.$$

Используя приведенную форму уравнения Ван-дер-Ваальса [1]

$$\tilde{P}(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{8\tilde{T}}{3\tilde{V} - 1} - \frac{3}{\tilde{V}^2},$$

получаем приведенные термодинамические коэффициенты для этого уравнения (для записи соотношений в оптимальной для выполнения вычислений форме использовано обозначение $w = 1 / \tilde{V}$):

$$\tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{8(3\tilde{V} - 1)}{24\tilde{V}\tilde{T} - 6\left(\frac{3\tilde{V} - 1}{\tilde{V}}\right)^2} = \frac{8(3 - w)}{24\tilde{T} - 6(3 - w)^2}, \quad a_{kp} = \frac{0.42748R^2 T_{kp}^2}{P_{rh}}, \quad \tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{(3\tilde{V} - 1)^2}{24\tilde{V}\tilde{T} - 6\left(\frac{3\tilde{V} - 1}{\tilde{V}}\right)^2} = \frac{(3 - w)^2}{24w\tilde{T} - 6(3 - w)^2}, \quad \Delta \tilde{c} = -\frac{32\tilde{V}\tilde{T}}{3\left(\frac{3\tilde{V} - 1}{\tilde{V}}\right)^2 - 12\tilde{V}\tilde{T}} = -\frac{32\tilde{T}}{3w(3 - w)^2 - 12\tilde{T}}. \quad (2.1)$$

Несложно убедиться в выполнении соотношения $\tilde{\alpha}_p = \tilde{\beta}_V \tilde{k}_T \tilde{P}$ для полученных коэффициентов.

3 Термодинамические коэффициенты в модели газа Редлиха – Квонга

Уравнение состояния Редлиха – Квонга [4] имеет молярную форму вида

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{\sqrt{TV}(V+b)}$$

и характеристики критического состояния [10]

$$V_{кр} = \frac{b}{\xi}, \quad P_{кр} = \left(\frac{Ra^2 \xi^7}{3b^5} \right)^{1/3}, \quad T_{кр} = \left(\frac{3a\xi^2}{bR} \right)^{2/3}. \quad (3.1)$$

В формулах (3.1) введена константа $\xi = \sqrt[3]{2} - 1 = 0,259921 \cong 0,260$. При этом возникают связи параметров уравнения с параметрами критического состояния

$$a = \frac{R^2 T_{кр}^{5/2}}{9\xi P_{кр}} = 0,427480 \frac{R^2 T_{кр}^{5/2}}{P_{кр}},$$

$$b = \frac{\xi R T_{кр}}{3P_{кр}} = 0,086640 \frac{R T_{кр}}{P_{кр}}.$$

Приведенный вид уравнения Редлиха – Квонга записывается как [10]

$$\tilde{P} = \frac{3\tilde{T}}{\tilde{V} - \xi} - \frac{1}{\xi\sqrt{\tilde{T}}\tilde{V}(\tilde{V} + \xi)}. \quad (3.2)$$

Используя (3.2), находим фигурирующие в (1.4) частные производные

$$\left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}} = \frac{3}{\tilde{V} - \xi} + \frac{1}{2\xi\tilde{T}^{3/2}\tilde{V}(\tilde{V} + \xi)},$$

$$\left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}} = \frac{2\tilde{V} + \xi}{\xi\tilde{T}^{1/2}\tilde{V}^2(\tilde{V} + \xi)^2} - \frac{3\tilde{T}}{(\tilde{V} - \xi)^2}. \quad (3.3)$$

Подставляя (3.3) в определение (1.4), с учётом (3.2) получаем выражение для приведенного изобарного коэффициента объёмного расширения $\tilde{\alpha}_p$ в виде

$$\tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{(\tilde{V} + \xi)(\tilde{V} - \xi) \left[6\xi\tilde{T}^{3/2}\tilde{V}(\tilde{V} + \xi) + \tilde{V} - \xi \right]}{2\tilde{T} \left[3\xi\tilde{V}^2\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi)^2 - (2\tilde{V} + \xi)(\tilde{V} - \xi)^2 \right]}$$

или, с использованием приведенного давления,

$$\tilde{\alpha}_p(\tilde{P}, \tilde{V}, \tilde{T}) \cong \frac{(\tilde{V}^2 - \xi^2) \left[9\tilde{T} - \tilde{P}(\tilde{V} - \xi) \right]}{2\tilde{T} \left[3\tilde{T}\tilde{V}(\tilde{V} + \xi) - (2\tilde{V} + \xi)(\tilde{V} - \xi)(3\tilde{T} - \tilde{P}\tilde{V} + \tilde{P}\xi) \right]}. \quad (3.4)$$

Для состояний, в которых приведенный объем $\tilde{V} \gg \xi$, формулу (3.4) можно упростить, введя в данном случае малый параметр $\varepsilon = \xi / \tilde{V} \ll 1$, что приводит к соотношению

$$\tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) \cong \frac{9\tilde{T} - \tilde{P}\tilde{V}(1 - \varepsilon)}{2\tilde{T} \left[2\tilde{P}\tilde{V}(1 - 3\varepsilon/2) - 3\tilde{T}(1 - 2\varepsilon) \right]}.$$

Теперь определяем явный вид приведенного изохорного термического коэффициента давления $\tilde{\beta}_V$, непосредственно используя выражения (3.3):

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{6\xi\tilde{V}\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi) + \tilde{V} - \xi}{2\tilde{T} \left[3\xi\tilde{V}\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi) - \tilde{V} + \xi \right]},$$

или

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{P}, \tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{3}{\tilde{P}(\tilde{V} - \xi)} + \frac{1}{2\xi\tilde{P}\tilde{T}^{3/2}\tilde{V}(\tilde{V} + \xi)}. \quad (3.5)$$

Формула (3.5) в случае применения того же малого параметра ε дает следующее приближенное выражение:

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{P}, \tilde{V}, \tilde{T}) \cong \frac{9(1 + \varepsilon)}{2\tilde{P}\tilde{V}} - \frac{1}{2\tilde{T}}.$$

Далее обратимся к нахождению вида приведенной изотермической сжимаемости \tilde{k}_T на основе формул (1.4), (3.3)

$$\tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{\xi\tilde{V}\sqrt{\tilde{T}}(\tilde{V} - \xi)^2(\tilde{V} + \xi)^2}{3\xi\tilde{V}^2\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi)^2 - (2\tilde{V} + \xi)(\tilde{V} - \xi)^2}.$$

Рассмотрение приближения по малому параметру $\varepsilon = \xi / \tilde{V}$ приводит к результату

$$\tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) \cong \frac{\xi\tilde{V}^2\sqrt{\tilde{T}}}{3(\xi\tilde{V}\tilde{T}^{3/2} + \varepsilon) - 2}.$$

Аналог формулы Майера в используемых приведенных переменных и приближение для малых значений параметра w имеют, соответственно, вид

$$\Delta\tilde{c}(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{\left[6\xi\tilde{V}\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi) + \tilde{V} - \xi \right]^2}{4\xi\tilde{T}^{3/2} \left[3\xi\tilde{V}^2\tilde{T}^{3/2}(\tilde{V} + \xi)^2 - (2\tilde{V} + \xi)(\tilde{V} - \xi)^2 \right]},$$

$$\Delta\tilde{c}(\tilde{V}, \tilde{T}) \cong \frac{36\xi^2\tilde{V}^2\tilde{T}^3 + 12\xi\tilde{V}\tilde{T}^{3,2} + 1 - 2\varepsilon}{4\xi\tilde{T}^{3/2} \left[3\xi\tilde{V}^2\tilde{T}^{3/2}(1 + 2\varepsilon) - 2 + \varepsilon \right]}.$$

Таким образом, в данном параграфе получены в приведенных переменных явные выражения термодинамических коэффициентов $\tilde{\alpha}_p$, $\tilde{\beta}_V$ и \tilde{k}_T и разности изобарной и изохорной теплоемкостей применительно к газам, подчиняющимся уравнению состояния Редлиха – Квонга, и получены их приближения с малым параметром.

4 Термодинамические коэффициенты в модели газа Соаве – Редлиха – Квонга

Уравнение Соаве – Редлиха – Квонга [5] имеет вид

$$\left(P + \frac{a(\tilde{T})}{V(V+b)} \right) (V-b) = RT.$$

При использовании уравнения необходимо учитывать связь параметров уравнения с параметрами критического состояния, в том числе

зависимость параметра, учитывающего притяжение молекул, от температуры

$$a(\tilde{T}) = a_{кр} \alpha(\tilde{T}), \quad \alpha(\tilde{T}) = \left[1 - m(1 - \sqrt{\tilde{T}}) \right]^2,$$

$$m = 0,480 + 1,574\omega - 0,175\omega^2,$$

$$a_{кр} = \frac{0,42748R^2T_{кр}^2}{P_{rh}}, \quad b = \frac{0,08664RT_{кр}}{P_{кр}},$$

$$\xi = \sqrt[3]{2} - 1, \quad \alpha(1) = 1, \quad \alpha'(\tilde{T}) = \frac{d\alpha(\tilde{T})}{d\tilde{T}}.$$

Здесь числовой параметр m соответствует конкретному газу (жидкости) с учетом параметра ω , учитывающего ацентричность молекул.

В приведенной форме уравнение Соаве – Редлиха – Квонга имеет вид

$$\tilde{P}(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{3\tilde{T}}{\tilde{V} - \xi} - \frac{\alpha(\tilde{T})}{\xi\tilde{V}(\tilde{V} + \xi)}.$$

В оптимальной для выполнения вычислений форме рассматриваемые термодинамические коэффициенты записываются следующим образом:

$$\tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{(\tilde{V} - \xi) \left[3\xi\tilde{V} - \alpha'(\tilde{T}) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right) \right]}{3\xi\tilde{V}^2\tilde{T} - \alpha(\tilde{T})(2\tilde{V} + \xi) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right)^2},$$

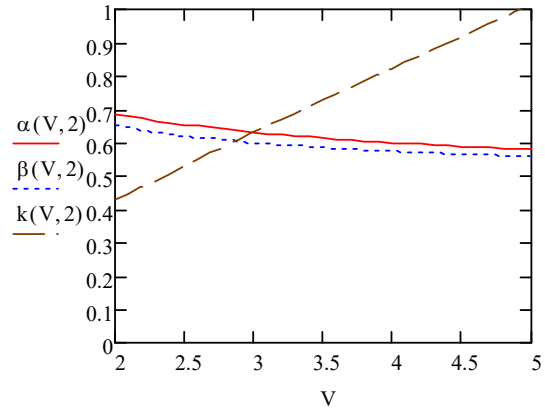
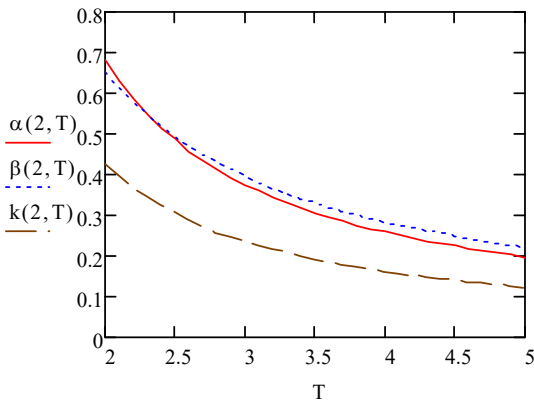


Рисунок 5.1 – Графики термодинамических коэффициентов, определяемых уравнением Ван-дер-Ваальса для значения $\tilde{V} = 2$ в диапазоне $2 \leq \tilde{T} \leq 5$ и для значения $\tilde{T} = 2$ в диапазоне $2 \leq \tilde{V} \leq 5$

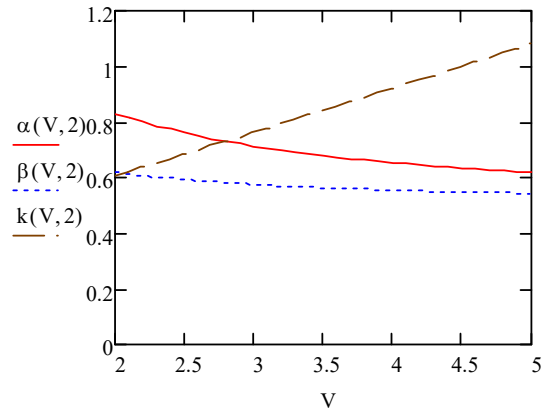
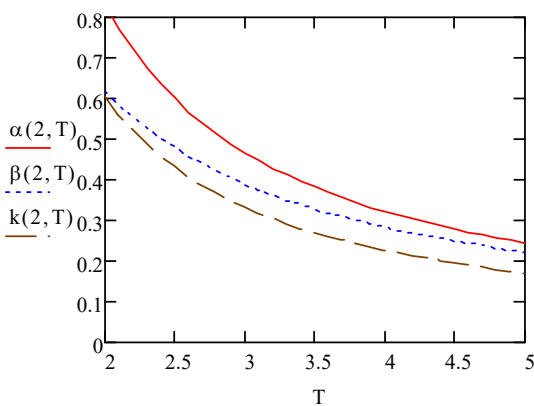


Рисунок 5.2 – Графики термодинамических коэффициентов, определяемых уравнением Соаве – Редлиха – Квонга для значения $\tilde{V} = 2$ в диапазоне $2 \leq \tilde{T} \leq 5$ и для значения $\tilde{T} = 2$ в диапазоне $2 \leq \tilde{V} \leq 5$

$$\tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{\xi\tilde{V}(\tilde{V} - \xi)^2}{3\xi\tilde{V}^2\tilde{T} - \alpha(\tilde{T})(2\tilde{V} + \xi) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right)^2},$$

$$\Delta\tilde{c}(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{\tilde{T} \left[3\xi\tilde{V} - \alpha'(\tilde{T}) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right) \right]^2}{3\xi^2\tilde{V}^2\tilde{T} - \alpha(\tilde{T})\xi(2\tilde{V} + \xi) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right)^2},$$

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{3\xi\tilde{V} - \alpha'(\tilde{T}) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right)}{3\xi\tilde{V}^2\tilde{T} - \alpha(\tilde{T}) \left(\frac{\tilde{V} - \xi}{\tilde{V} + \xi} \right)}.$$

5 Графическое исследование термодинамических коэффициентов реальных газов

На основании полученных соотношений построены графики, отображающие обобщенное поведение термодинамических коэффициентов в приведенных переменных. В таком подходе на первый план выходит именно структура уравнения состояния, что позволяет сопоставлять различные уравнения и влияние отдельных элементов уравнения на поведение рассмотренных величин.

Заключение

Таким образом, в данной работе предложена новая форма записи соотношений, определяющих физические параметры (термодинамические коэффициенты) на основании уравнений состояния реальных газов. Для каждого соотношения выделена основная безразмерная часть, выраженная через приведенные термодинамические переменные. Для уравнений состояния Ван-дер-Ваальса, Соаве – Редлиха – Квонга и Редлиха – Квонга получен явный вид приведенных соотношений в удобной для проведения вычислений форме. Построены графики коэффициентов в приведенных переменных в области $2 \leq \tilde{V} \leq 5$, $2 \leq \tilde{T} \leq 5$.

Полученные результаты в определенном смысле расширяют область применимости закона соответственных состояний и могут быть использованы в качестве основы для анализа применимости различных уравнений состояния реальных газов к описанию экспериментальных данных, а также для предсказания физических параметров новых веществ на основе закона соответственных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. Румер, Ю.Б. Термодинамика, статистическая физика и кинетика / Ю.Б. Румер, М.Ш. Рывкин. – Новосибирск: Издательство Новосибирского университета, 2000. – 608 с.
2. Кудинов, В.А. Техническая термодинамика и теплопередача / В.А. Кудинов, Э.М. Карташов, Е.В. Стефанюк. – Москва: Издательство Юрайт, 2021. – 454 с.
3. Уэйлес, С. Фазовые равновесия в химической технологии: в 2-ч ч. – Ч.1. / С. Уэйлес – Москва: Мир, 1989. – 304 с.
4. Redlich, O. On the thermodynamics of solutions V. equation of state: fugacity of gaseous solutions / O. Redlich, J.N.S. Kwong // Chemical Reviews. – 1949. – Vol. 44. – P. 233–244.
5. Soave, G. Equilibrium constants from a modified Redlich – Kwong equation of state /

G. Soave // Chem. Engng. Sci. – 1972. – Vol. 2. – P. 1197–1203.

6. Peng, D.Y. A new two-constant equation of state / D.Y. Peng, D.B. Robinson // Ind. Eng. Chem. Fundam. – 1976. – Vol. 15, № 1. – P. 59–64.

7. Wenying, Zh. A Review of the Alpha Functions of Cubic Equations of State for Different Research Systems / Zhao Wenying, Xia LI, Sun Xiaoyan, Xiang Shuguang // International Journal of Thermophysics. – 2019. – Vol. 40. – P. 105.

8. Chen, X. An improved volume-translated SRK EOS dedicated to more accurate determination of saturated and single-phase liquid densities / Xin Chen, Huazhou Li // Fluid Phase Equilibria. – 2020. – Vol. 521. – P. 2724.

9. Towards a predictive Cubic Plus Association equation of state / Pedro Velho, Xiaodong Liang, Eugénia A. Macedo, Elena Gómez, Georgios M. Kontogeorgis // Fluid Phase Equilibria. – 2021. – Vol. 540. – P. 113045.

10. Дей, Е.А. Расчёт параметров изоэнтальпического охлаждения газов Редлиха – Квонга / Е.А. Дей, О.В. Новикова, Г.Ю. Тюменков // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2012. – № 6 (75). – С. 38–42.

11. Дей, Е.А. Кривые инверсии эффекта Джоуля – Томсона для обобщенного уравнения Ван-дер-Ваальса / Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2015. – № 6 (93). – С. 117–120.

12. Дей, Е.А. Граничные параметры для состояния растянутой жидкости / Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков // Проблемы физики, математики и техники. – 2018. – № 4 (37). – С. 18–20.

Поступила в редакцию 14.10.2022.

Информация об авторах

Дей Евгений Александрович – к.ф.-м.н., доцент
Тюменков Геннадий Юрьевич – к.ф.-м.н., доцент

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ АЛМАЗОВ

В.А. Емельянов¹, Е.Б. Шершнев², Ю.В. Никитюк², С.И. Соколов², И.Ю. Аушев³¹ОАО «Интеграл», Минск²Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины³Университет гражданской защиты МЧС Республики Беларусь, Минск

OPTIMIZATION OF LASER PROCESSING OF DIAMONDS

V.A. Emelyanov¹, E.B. Shershnev², Y.V. Nikitjuk², S.I. Sokolov², I.Y. Aushev³¹JSC "INTEGRAL", Minsk²Francisk Skorina Gomel State University³University of Civil Protection of the Ministry for Emergency Situations of the Republic of Belarus, Minsk

Аннотация. С применением генетического алгоритма MOGA программы ANSYS Workbench проведена оптимизация параметров лазерной резки алмазов. Конечно-элементный расчет температур и термоупругих напряжений выполнялся с использованием языка программирования APDL. С применением гранцентрированного варианта центрального композиционного плана эксперимента построена регрессионная модель лазерной резки алмазов. В качестве варьируемых факторов использовались скорость резки, радиус лазерного пучка и плотность мощности лазерного излучения. В качестве откликов использовались максимальные температуры и термоупругие напряжения в зоне лазерной обработки. Оценка влияния параметров обработки на максимальные температуры и напряжения, формируемые лазерным излучением, показала, что основным фактором является плотность мощности лазерного излучения. Оптимизация лазерной резки алмазов выполнялась для двух вариантов постановки задачи: по критерию минимума термоупругих напряжений и по критериям минимума термоупругих напряжений и максимума скорости обработки. Выполнено сравнение параметров, полученных в результате оптимизации, и параметров, полученных в результате конечно-элементного моделирования. Максимальная относительная погрешность результатов, полученных при использовании алгоритма MOGA, не превысила 9% при определении температур и 15% при определении термоупругих напряжений. В результате моделирования определены параметры обработки, использование которых обеспечит повышение производительности и надёжности лазерной резки алмазов.

Ключевые слова: лазерная резка, алмаз, MOGA, ANSYS.

Для цитирования: Оптимизация параметров лазерной обработки алмазов / В.А. Емельянов, Е.Б. Шершнев, Ю.В. Никитюк, С.И. Соколов, И.Ю. Аушев // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 30–36. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_30. – EDN: KYDPZC

Abstract. Using the genetic algorithm MOGA of the ANSYS Workbench program, the parameters of laser cutting of diamonds were optimized. The finite element calculation of temperatures and thermoelastic stresses was performed using the APDL programming language. Using a face-centered version of the central compositional plan of the experiment, a regression model of laser cutting of diamonds was constructed. Cutting speed, laser beam radius, and laser power density were used as variable factors. The maximum temperatures and thermoelastic stresses in the laser treatment zone were used as responses. An assessment of the influence of processing parameters on the maximum temperatures and voltages generated by laser radiation showed that the main factor is the power density of laser radiation. Optimization of laser cutting of diamonds was carried out for two options for setting the problem: according to the criterion of minimum thermoelastic stresses and according to the criteria of minimum thermoelastic stresses and maximum processing speed. The parameters obtained as a result of optimization and the parameters obtained as a result of finite element modeling are compared. The maximum relative error of the results obtained using the MOGA algorithm did not exceed 9% when determining temperatures and 15% when determining thermoelastic stresses. As a result of the simulation, the processing parameters were determined, the use of which will increase the productivity and reliability of laser cutting of diamonds.

Keywords: laser cutting, diamond, MOGA, ANSYS.

For citation: Optimization of laser processing of diamonds / V.A. Emelyanov, E.B. Shershnev, Y.V. Nikitjuk, S.I. Sokolov, I.Y. Aushev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 30–36. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_30 (in Russian). – EDN: KYDPZC

Введение

Свойства алмаза обеспечивают стабильную работу устройств, созданных на его основе, в критических условиях и делают перспективным его применение при создании новой техники [1]. Лазерная обработка кристаллов алмаза имеет ряд

преимуществ, к которым относится возможность получения узких резов в сочетании с высокой производительностью процесса размерной обработки. Также следует отметить возможность автоматизации процесса лазерной резки алмаза [2], [3]. В работах [3]–[8] ранее авторами выполнено

моделирование лазерной обработки кристаллов алмазов и проведены экспериментальные исследования.

В настоящее время получило развитие новое направление математического моделирования – метамоделирование, при реализации которого модели сложных систем формируются в результате вычислительных экспериментов. Данные модели называются метамоделами (модели над моделями) или суррогатными моделями. При этом метамоделами характеризуются значительно более высокой вычислительной эффективностью по сравнению с исходными моделями [9]–[11]. Одной из целей метамоделирования является определение приближенных значений выходных параметров на основе входных параметров без выполнения полных расчетов. Достижение данной цели обеспечивается в результате применения метода планирования вычислительных экспериментов при нахождении соответствующих регрессионных выражений [9], [12], [13]. Другой целью метамоделирования является использование созданных моделей при оптимизации параметров конструкций и технологических процессов [10], [11].

Оптимизация является важным направлением повышения эффективности использования лазерных технологий, примеры реализации которой с применением, в том числе генетических алгоритмов, представлены в работах [14]–[18]. Генетические алгоритмы являются частным случаем эволюционных методов и обеспечивают поиск лучших решений при помощи наследования и усиления полезных свойств множества объектов в процессе имитации их эволюции [19], [20]. Одним из эффективных генетических алгоритмов является алгоритм MOGA (Multi-Objective Genetic Algorithm) [21].

В работах [16]–[18], [20], [22], [23] представлены результаты оптимизации параметров конструкций и параметров технологических процессов с использованием алгоритма MOGA, реализованного в модуле DesignXplorer программы ANSYS Workbench [24].

В данной работе выполнена оптимизация параметров лазерной обработки алмазов круглыми лазерными пучками с использованием генетического алгоритма MOGA модуля DesignXplorer программы ANSYS Workbench.

1 Определение оптимальных параметров лазерной резки алмазов

Температурные поля и поля термоупругих напряжений, формируемые в кристаллах алмаза при лазерной обработке, являются характеристиками, определение которых необходимо для выбора эффективных технологических режимов. Соответствующие расчеты выполнялись в рамках несвязанной задачи термоупругости в квазистатической постановке [25] с использованием

языка программирования APDL (ANSYS parametric design language) [24].

Расчеты выполнялись для образца, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда с геометрическими размерами $2 \times 3 \times 1,5$ мм. Для моделирования была сформирована модель, состоящая из 45418 элементов (рисунок 1.1). Для теплового анализа применялись элементы Solid 70, для прочностного анализа применялись элементы Solid 64. При расчетах использовались свойства алмазов, приведенные в работах [2], [26], [27]. Расчетные значения температурных полей представлены на рисунке 1.2.

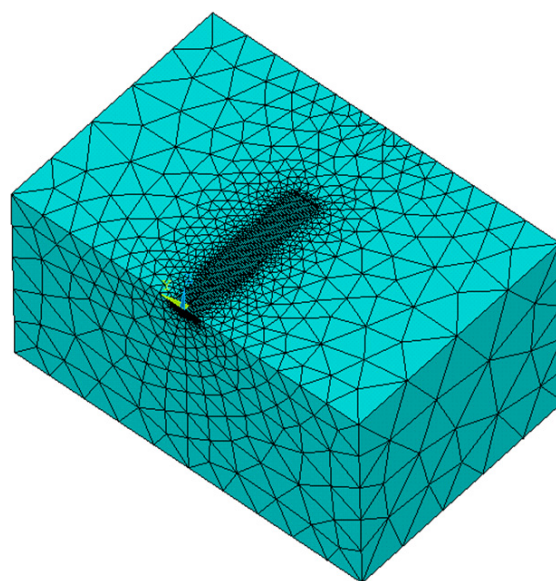


Рисунок 1.1 – Конечно-элементная модель

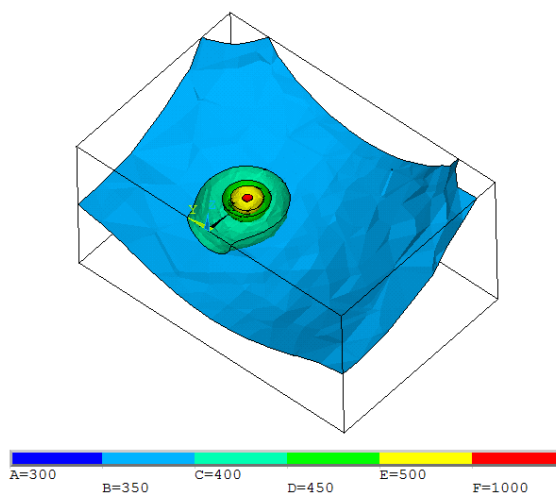


Рисунок 1.2 – Распределение температуры в объеме обрабатываемого алмаза, K
 $V = 5$ мм/с, $R = 6$ мм, $P = 10^{10}$ Вт/м²

Оптимизация параметров лазерной обработки проводилась с использованием модуля Ansys DesignXplorer расчетной среды Ansys Workbench в соответствии с последовательностью действий, представленных в работе [22].

При создании поверхности отклика был использован трехфакторный факторно-центрированный вариант центрального композиционного плана эксперимента [12]–[13]. В качестве факторов эксперимента были выбраны скорость обработки V , радиус лазерного пучка R и плотность мощности лазерного излучения P_0 . Определялись следующие выходные параметры: максимальная температура в зоне лазерной обработки T , максимальные напряжения в зоне обработки σ_1 , (таблица 1.1).

Таблица 1.1 – План эксперимента и результаты вычислений

№	P_1 $V, \text{ м/с}$	P_2 $R, \text{ м}$	P_3 $P_0, \text{ Вт/м}^2$	P_4 $T, \text{ К}$	P_5 $\sigma_1, \text{ Па}$
1	0,001	0,00005	$5 \cdot 10^{10}$	5199	$2,53 \cdot 10^9$
2	0,001	0,00006	$3 \cdot 10^{10}$	3967	$1,87 \cdot 10^9$
3	0,001	0,00007	$5 \cdot 10^{10}$	7597	$3,67 \cdot 10^9$
4	0,005	0,00005	$3 \cdot 10^{10}$	3178	$1,51 \cdot 10^9$
5	0,005	0,00006	10^{10}	1489	$8,04 \cdot 10^8$
6	0,005	0,00006	$3 \cdot 10^{10}$	3882	$1,87 \cdot 10^9$
7	0,005	0,00006	$5 \cdot 10^{10}$	6275	$3,14 \cdot 10^9$
8	0,005	0,00007	$3 \cdot 10^{10}$	4559	$2,20 \cdot 10^9$
9	0,009	0,00005	10^{10}	1252	$7,63 \cdot 10^8$
10	0,009	0,00005	$5 \cdot 10^{10}$	5087	$2,53 \cdot 10^9$
11	0,009	0,00006	$3 \cdot 10^{10}$	3869	$1,87 \cdot 10^9$
12	0,009	0,00007	10^{10}	1709	$8,29 \cdot 10^8$
13	0,009	0,00007	$5 \cdot 10^{10}$	7374	$3,69 \cdot 10^9$
14	0,001	0,00005	10^{10}	1274	$8,16 \cdot 10^8$
15	0,001	0,00007	10^{10}	1754	$9,35 \cdot 10^8$

Моделью объекта исследования являлись функции отклика, связывающие выходные параметры (T, σ_1) с факторами (V, R, P_0), которые менялись в заданных пределах при проведении численных экспериментов (таблица 1.1).

Полученные уравнения регрессии имеют следующий вид:

$$T = 316 - 2,01 \cdot 10^{-8} P_0 + 1,89 \cdot 10^6 V^2 - 3,12 \cdot 10^8 VR - 4,22 \cdot 10^{-7} VP_0 + 2,38 \cdot 10^{-3} RP_0,$$

$$\sigma_1 = 3,89 \cdot 10^8 - 2,64 \cdot 10^{-2} P_0 + 2,61 \cdot 10^{-13} P_0^2 + 1,13 \cdot 10^3 RP_0.$$

Для оценки полученных регрессионных моделей были использованы следующие критерии: – коэффициент детерминации

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (d_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d})^2},$$

– среднеквадратичная ошибка $RMSE$ (Root Mean Square Error)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (d_i - y_i)^2},$$

где d_i – значения, определенные методом конечных элементов, y_i – значения, определенные с использованием регрессионных моделей.

Значения коэффициентов детерминации для выходных параметров T и σ_1 принимают значения, равные 0,999 и 0,9981, а значения $RMSE$ для T и σ_1 равны 13,3 К и $4,27 \cdot 10^7$ Па соответственно, что можно интерпретировать как наличие необходимого соответствия регрессионной модели данным конечно-элементного анализа.

Была проведена оценка влияния входных параметров на выходные параметры. Установлено, что на значения максимальных температур T в зоне лазерной обработки и на величину максимальных термоупругих напряжений σ_1 наибольшее влияние оказывают значения плотности мощности лазерного излучения (рисунки 1.3, 1.4).

Эффективность нагрева лазерным излучением зависит как от параметров излучения, так и от свойств обрабатываемого материала, который должен обладать достаточной поглощательной способностью для излучения данной длины волны. На практике для решения этой задачи поверхность алмаза покрывают слоем вещества с низкой теплопроводностью и большим коэффициентом поглощения. Использование покрытия необходимо только на начальном этапе. В дальнейшем на поверхности алмаза в результате воздействия лазерного излучения формируется графитсодержащая пленка, которая эффективно поглощает энергию лазерного излучения. Можно считать, что стадия интенсивной графитизации алмаза наступает при достижении обрабатываемым материалом температуры 2300 К [2].

С учетом данного условия оптимизация лазерной обработки алмазов осуществлялась с использованием многокритериального генетического алгоритма MOGA модуля DesignXplorer с числом индивидов начальной популяции, равным 500, и числом индивидов за итерацию, равным 500 для двух вариантов постановки задачи:

1) по критерию минимума термоупругих напряжений

$$\sigma_1 \rightarrow \min$$

при задании значений максимальной температуры в зоне обработки $T \geq 2300\text{К}$.

2) по критериям минимума термоупругих напряжений

$$\sigma_1 \rightarrow \min$$

и максимума скорости обработки $V \rightarrow \max$

при задании значений максимальной температуры в зоне обработки $T \geq 2300\text{К}$.

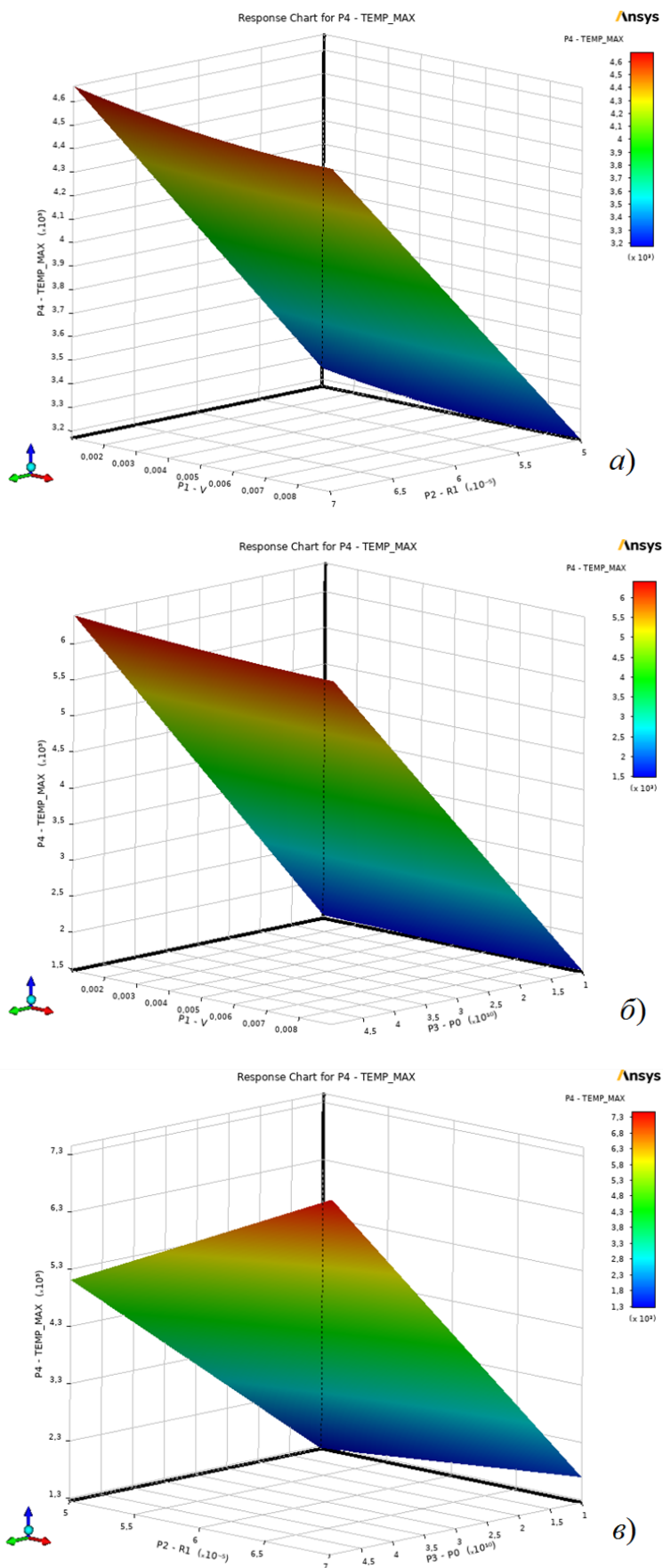


Рисунок 1.3 – Зависимость максимальной температуры T от параметров обработки:
 а) P_0 – const, б) R – const, в) V – const

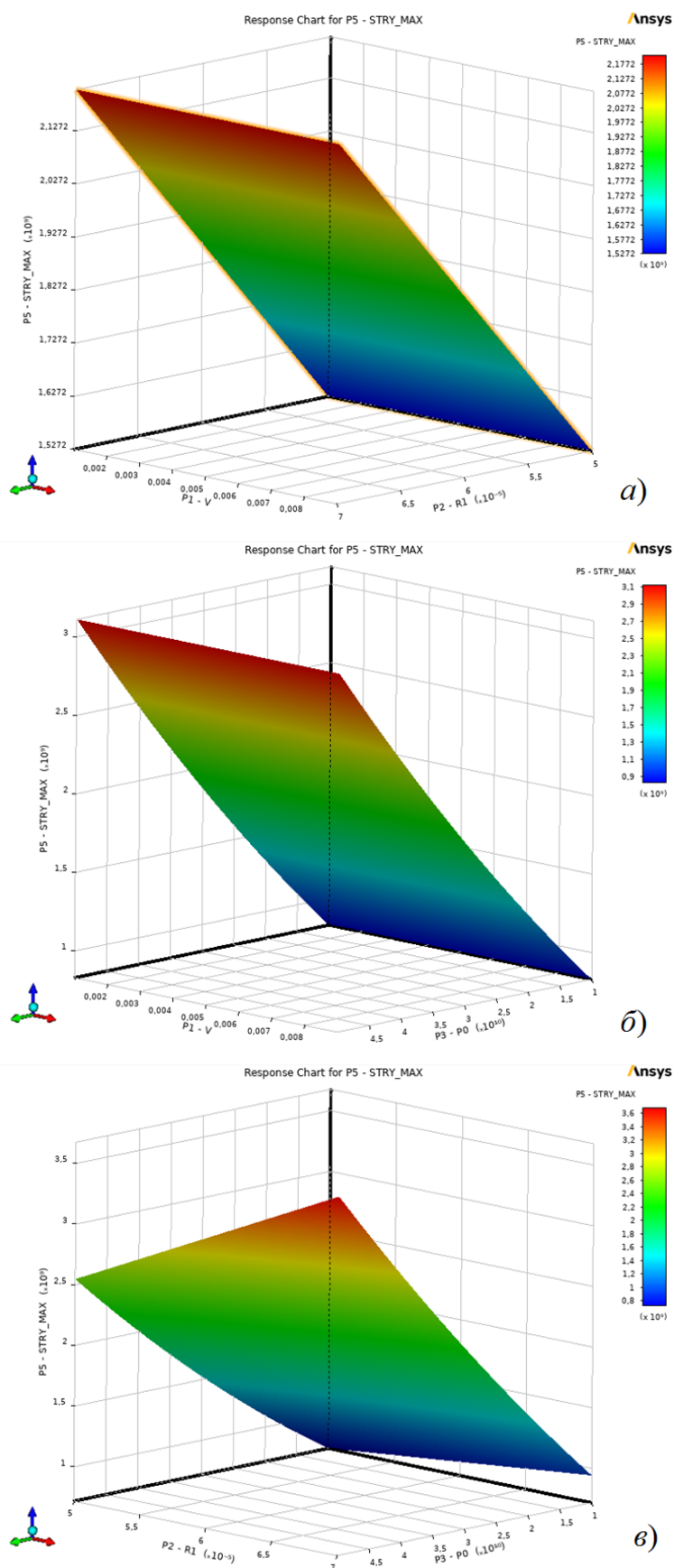


Рисунок 1.4 – Зависимость максимальных напряжений σ_1 от параметров обработки:
 а) $P_0 - \text{const}$, б) $R - \text{const}$, в) $V - \text{const}$

2 Результаты оптимизации

Результаты оптимизации приведены в таблице 2.1. В скобках приведены значения параметров, полученные в результате конечно-элементного моделирования, при этом максимальная относительная погрешность результатов, полученных при использовании алгоритма MOGA, не превысила 9% при определении температур и 15% при определении термоупругих напряжений.

Таблица 2.2 – Результаты оптимизации

№	1	2
P_1 V , м/с	0,0078	0,0088
P_2 R , м	0,00006	0,00007
P_3 P_0 , Вт/м ²	$1,63 \cdot 10^{10}$	$1,59 \cdot 10^{10}$
P_4 T , К	2305 (2237)	2329 (2545)
P_5 σ_1 , Па	$9,08 \cdot 10^8$ ($1,00 \cdot 10^9$)	$9,94 \cdot 10^8$ ($1,16 \cdot 10^9$)

Заключение

В работе показана возможность оптимизации параметров лазерной обработки алмазов с использованием генетического алгоритма MOGA модуля DesignXplorer. С использованием гранцентрированного варианта центрального композиционного плана эксперимента была получена регрессионная модель лазерной резки алмазов. Установлено наличие необходимого соответствия регрессионной модели результатам конечно-элементного анализа. В результате численного эксперимента определены оптимальные параметры лазерной обработки алмазов, с хорошей точностью согласующиеся с результатами экспериментальных исследований [3], которые могут быть использованы в технологических процессах обработки алмазов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Митягин, А.Ю. Технология и оборудование для обработки алмазных материалов современной техники / А.Ю. Митягин, А.А. Алтухов, А.Б. Митягина // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2009. – № 1. – С. 53–58.
2. Физические основы лазерной обработки алмазов: в 15 кн.: учеб. пособие для ВТУЗов / А.И. Шкадов; под ред. А.М. Бочарова. – Смоленск, 1997. – Кн. 3: Физические основы лазерной обработки алмазов. – 288 с.
3. Ретюхин, Г.Е. Размерная обработка ювелирных алмазов излучением YAG:ND лазера с модулированной добротностью / Г.Е. Ретюхин, А.Г. Кошечев, И.В. Файн, Е.Б. Шершнева // Весці

НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэх. навук. – 2001. – № 1. – С. 73–77.

4. Dependence of the diamond laser processing efficiency on crystallographic directions / S.V. Shalupaev, E.B. Shershnev, Y.V. Nikitjuk, V.V. Sviridova // SPIE. – 2001. – Vol. 4358. – P. 329–333.

5. Шершнева, Е.Б. Моделирование лазерной обработки кристаллов алмаза / Е.Б. Шершнева, Ю.В. Никитюк, А.Е. Шершнева // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2011. – № 6 (69). – С. 164–168.

6. Особенности формирования термоупругих полей при лазерной обработке кристаллов алмаза / Е.Б. Шершнева, Ю.В. Никитюк, А.Е. Шершнева, С.И. Соколов // Проблемы физики, математики и техники. – 2015. – № 1 (22). – С. 38–40.

7. Особенности применения лазерного излучения с длинами волн 1064 нм, 532 нм и 266 нм для обработки кристаллов алмаза / Е.Б. Шершнева, Ю.В. Никитюк, А.Е. Шершнева, С.И. Соколов // Проблемы физики, математики и техники. – 2017. – № 1 (30). – С. 22–24.

8. Емельянов, В.А. Изучение влияния примесей на процессы формообразования синтетического алмаза в зоне термического влияния лазерного излучения / В.А. Емельянов, Е.Б. Шершнева, А.Н. Купо, С.И. Соколов // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2022. – № 3 (132). – С. 117–120.

9. Сокращение размерности данных в задачах имитационного моделирования / Ю.Г. Агалаков, А.В. Бернштейн // Информационные технологии и вычислительные системы. – 2012. – № 3. – С. 3–17.

10. Koziel, S. Surrogate-based modeling and optimization / S. Koziel, L. Leifsson. – New York: Springer, 2013.

11. Jiang, P. Surrogate model-based engineering design and optimization / P. Jiang, Q. Zhou, X. Shao. – Berlin / Heidelberg, Germany: Springer, 2020.

12. Планирование и анализ результатов эксперимента: учеб. пособие / А.П. Моргунов, И.В. Ревина; Минобрнауки России, ОмГТУ. – Омск: Изд-во ОмГТУ, 2014. – 343 с.

13. Адлер, Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский. – Москва: Наука, 1976. – 278 с.

14. Бессмельцев, В.П. Оптимизация режимов лазерной микрообработки / В.П. Бессмельцев, Е.Д. Булушев // Автометрия. – 2014. – Т. 50, № 6. – С. 3–21.

15. Parandoush, P. A review of modeling and simulation of laser beam machining / P. Parandoush, A. Hossain // International Journal of Machine Tools and Manufacture. – 2014. – Vol. 85. – P. 135–145.

16. Nikityuk, Y.V. Optimization of two-beam laser cleavage of silicate glass / Y.V. Nikityuk,

A.N. Serdyukov, I.Y. Aushev // J. Opt. Technol. – 2022. – № 89. – P. 121–125.

17. Оптимизация параметров обработки стали 12Х18Н9Т круглыми лазерными пучками / Ю.В. Никитюк [и др.] // Вестник ГГТУ им. П.О. Сухого: научно-практический журнал. – 2022. – № 2. – С. 17–24.

18. Никитюк, Ю.В. Оптимизация параметров лазерного раскалывания кварцевого стекла / Ю.В. Никитюк, А.Н. Сердюков, И.Ю. Аушев // Проблемы физики, математики и техники. – 2021. – № 4 (49). – С. 21–28.

19. Емельянов, В.В. Теория и практика эволюционного моделирования / В.В. Емельянов, В.В. Курейчик, В.М. Курейчик. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 432 с.

20. Красновская, С.В. Обзор возможностей оптимизационных алгоритмов при моделировании конструкций компрессорно-конденсаторных агрегатов методом конечных элементов / С.В. Красновская, В.В. Напрасников // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-тэхнічных навук. – 2016. – № 2. – С. 92–98.

21. Fonseca, C. Genetic algorithms for multiobjective optimization: Formulation discussion and generalization / C. Fonseca, P. Flemingz // In Proceedings of The 5th International Conference on Genetic Algorithms. CA, USA. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers Inc. – 1993. – P. 416–423.

22. Multi-objective optimization of microstructure of gravure cell based on response surface method / S. Wu, J. Xing, L. Dong, H. Zhu // Processes. – 2021. – Vol. 9, № 403. – P. 1–15.

23. Griffiths, J. Optimization of process parameters in laser transmission welding for food packaging applications / J. Griffiths, C. Dowding // Procedia CIRP. – 2018. – № 74. – P. 528–532.

24. Официальный сайт компании ANSYS. – Режим доступа: <https://www.ansys.com>. – Дата доступа: 04.05.2022.

25. Коваленко, Л.Д. Основы термоупругости / Л.Д. Коваленко. – Киев: Наукова думка, 1970. – 307 с.

26. Природные и синтетические алмазы / Г.Б. Бокий [и др.]. – Москва: Наука, 1986. – 221 с.

27. Физические свойства алмаза / Н.В. Новиков [и др.]. – 1987. – 201 с.

Поступила в редакцию 10.11.2022.

Информация об авторах

Емельянов Виктор Андреевич – чл.-корр. НАН Беларуси, д.т.н., профессор

Шеринев Евгений Борисович – к.т.н., доцент

Никитюк Юрий Валерьевич – к.ф.-м.н., доцент

Соколов Сергей Иванович – ст. преподаватель

Аушев Игорь Юрьевич – к.т.н., доцент

УДК 539.3

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_37

EDN: LQYCCM

РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ ТРУБОПРОВОДА (СОСУДА) ИЗ КОМПОЗИТА

В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

IMPLEMENTATION OF A MATHEMATICAL MODEL FOR CALCULATING NATURAL VIBRATIONS OF A PIPELINE (VESSEL) MADE OF COMPOSITE

V.V. Mozharovsky, S.V. Kirhintsava

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Рассматривается компьютерная реализация методики расчета собственных колебаний трубопровода (сосуда) из композита, построенной на основе решения краевой задачи для дифференциального уравнения 4-го порядка, описывающего поперечные колебания протяженного прямолинейного участка трубопровода с различными граничными условиями. Исследованы собственные поперечные колебания трубопровода из композита и функционально-градиентного материала, содержащего равномерно движущуюся жидкость с постоянной скоростью.

Ключевые слова: собственные колебания, трубопровод, композит, функционально-градиентный материал, математическая модель.

Для цитирования: Можаровский, В.В. Реализация математической модели расчета собственных колебаний трубопровода (сосуда) из композита / В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 37–42. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_37. – EDN: LQYCCM

Abstract. The paper considers a computer implementation of a method for calculating the natural oscillations of a pipeline (vessel) made of composite, based on the solution of a boundary value problem for a 4th-order differential equation describing transverse oscillations of an extended rectilinear section of the pipeline with different boundary conditions. The intrinsic transverse vibrations of a pipeline made of composite and a functionally gradient material containing a uniformly moving fluid with a constant velocity are investigated.

Keywords: natural oscillations, pipeline, composite, functionally gradient material, mathematical model.

For citation: Mozharovsky, V.V. Implementation of a mathematical model for calculating natural vibrations of a pipeline (vessel) made of composite / V.V. Mozharovsky, S.V. Kirhintsava // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 37–42. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_37 (in Russian). – EDN: LQYCCM

Введение

На современном уровне развития математических моделей применительно к расчетам напряженно-деформированного состояния элементов конструкций, таких как трубы, сосуды имеется обширная литература [1]–[4], но в тоже время возникает необходимость создания новых компьютерных программ расчета этих сложных элементов конструкций из композиционных материалов с учетом изменяющихся граничных и краевых условий, динамических нагрузений и функционально-градиентных свойств материалов (ФГМ). Несмотря на большие достижения в области расчета слоистых цилиндрических тел с учетом эффектов композитов, проблема решения смешанных задач с различными граничными условиями применительно моделированию работы колебаний, например, трубопроводов, слоистых сосудов из композитов или функционально-градиентных материалов и др. элементов машин достаточно полно не освещена.

1 Постановка задачи и методика решения

Известно, что математическая модель, описывающая поперечные колебания трубопровода (или сосуда как на макроуровне, так и на микроуровне) с равномерно движущейся жидкостью, сводится к решению краевой задачи для дифференциального уравнения 4-го порядка

$$a_4 \frac{\partial^4 w}{\partial \zeta^4} + a_2 \frac{\partial^2 w}{\partial \zeta^2} + a_1 \frac{\partial^2 w}{\partial \zeta \partial t} + a_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1)$$

с заданными граничными условиями. Входящие коэффициенты $a_i, i = 0, 1, 2, 4$ [2], [3] изменяются в зависимости от свойств материала и конструкции трубы, и их удобно представить в виде таблицы 1.1.

Построим алгоритм решения поставленной задачи в таком универсальном виде, для которого можно удобно проводить реализацию расчета. Решение ищем в виде $w(\zeta, t) = Wu(\zeta/L)e^{i\Omega t}$, где u – комплексная безразмерная амплитуда поперечного перемещения трубы; W – некоторое

характерное поперечное перемещение трубы; Ω – частота собственных колебаний трубы; t – переменная по времени.

Таблица 1.1 – Коэффициенты a_i в зависимости от решаемой задачи

Коэффициенты a_i	Однородный материал трубы (или композит)	ФГМ
a_4	EI	$EI_{eg} + GA_{eg}L^2$
a_2	$\rho_2 v_0^2$	$\alpha m_f u_f^2$
a_1	$2\rho_2 v_0$	$2m_f u_f$
a_0	$\rho_1 + \rho_2$	$m_f + m_p$

Характеристическое уравнение (1.1) можно записать в безразмерных переменных в следующем виде [2]:

$$a_4 u^{(4)} + a_2 u^{(2)} + ia_1 \Omega u' - a_0 \Omega^2 u = 0, \quad (1.2)$$

где для однородного материала [2]: $\omega = \Omega L / V_0$ – безразмерная собственная частота; $x = \zeta / L$ – безразмерная координата; $V_0 = L^{-1} \sqrt{E \cdot I / (\rho_1 + \rho_2)}$ – характерная скорость распространения упругих колебаний в трубе; $\alpha = v_0 / V_0$ – скоростной параметр; $N = m_2 / (m_1 + m_2)$ – инерционный параметр, например, для тонкостенной трубы $N = (1 + 2(\delta R / R)(\rho_1 / \rho_2))^{-1}$; $I \approx \pi R^3 \delta R$ – момент инерции трубы; i – мнимая единица;

для функционально-градиентных материалов (ФГМ) [3]: $\gamma = EI_{eg} / (E_c \cdot I)$;

$$\mu = GA_{eg} L^2 / (E_c \cdot I); \quad U = \sqrt{m_2 / (E_c \cdot I)} \alpha L;$$

$$Mr = m_2 / (m_2 + m_1); \quad EI_{eg} = \int_0^{2\pi R_m} \int_{-h/2}^{h/2} E(z) z^2 dz dr;$$

$$GA_{eg} = \int_0^{2\pi R_m} \int_{-h/2}^{h/2} \frac{E(z)}{2(1+\nu)} dz dr; \quad m_1 = \int_0^{2\pi R_m} \int_{-h/2}^{h/2} \rho(z) dz dr;$$

$$m_2 = \rho_2 A_2; \quad \rho(z) = V_c \rho_c + V_m \rho_m;$$

$$E(z) = V_c E_c + V_m E_m; \quad V_m = ((2z + h) / (2h))^s;$$

$V_c = 1 - V_m$; $L, R, \delta R, \rho, E$ и ν – длина, радиус, толщина стенки, плотность, модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала трубы соответственно; $\rho_1 (m_1)$ и $\rho_2 (m_2)$ – погонная плотность (масса) материала трубы и транспортируемой среды соответственно; α – скоростной параметр; A_2 – площадь поперечного сечения потока; s – показатель, описывающий профиль объемной доли ($0 \leq s \leq \infty$) для ФГМ; индексы m и c указывают внутренний и внешний слой соответственно.

Возможны различные способы закрепления концов трубы с граничными условиями, которые записаны в таблице 1.2. Известно [2], что част-

ное решение уравнения (1.2) находится по зависимости $u = Ce^{kx}$ и затем строится характеристическое уравнение для нахождения комплексных значений k . Тогда общее решение уравнения (1.2) будет иметь вид

$$u(x) = \sum_{j=1}^4 C_j e^{k_j(x)}. \quad (1.3)$$

Исходя из граничных условий для краевой задачи, получаем систему алгебраических уравнений для нахождения неизвестных коэффициентов C_j , строим алгоритм расчета определителя матрицы для нахождения собственных частот при колебаниях. Находим нетривиальные решения, приравняв определитель соответствующей матрицы к нулю (таблица 1.2).

Легко можно заметить, что выполняется следующее равенство: $G_4 = \prod_{i=1}^4 k_i^2 \cdot G_2$.

В связи с тем, что при решении данных задач определитель G является комплексным, рассматривается условие, когда выполняется равенство $G \cdot \bar{G} = 0$, где чертой обозначена операция комплексного сопряжения. Для нахождения параметров неизвестных значений комплексного волнового параметра $k = k_j, j = 1, 2, 3, 4$ дифференциального уравнения (1.2) характеристическое уравнение представляется в виде:

$$k^4 + pk^2 + iqk + r = 0, \quad (1.4)$$

где коэффициенты p, q, r зависят от рассматриваемой задачи, и, применяя формулу Феррари, запишем резольвенту уравнения (1.4) [5]

$$f(\xi) = \xi^3 - p\xi^2 - 4r\xi + 2pr + q^2 = 0 \quad (1.5)$$

Определив корни кубического уравнения (1.5) [6]

$$\xi_1 = \frac{p_1 c_0 - b_0}{1 - p_1},$$

$$\xi_2 = \frac{-(2b_0 + 2p_1^2 c_0 + p_1 f_1)}{2 + 2p_1 + 2p_1^2} +$$

$$+ \left((2b_0 + 2p_1^2 c_0 + p_1 f_1)^2 - 4(1 + p_1 + p_1^2) \times \right. \\ \left. \times (b_0^2 + p_1^2 c_0^2 + p_1 f_1^2) \right)^{1/2} / (2 + 2p_1 + 2p_1^2),$$

$$\xi_3 = \frac{-(2b_0 + 2p_1^2 c_0 + p_1 f_1)}{2 + 2p_1 + 2p_1^2} -$$

$$- \left((2b_0 + 2p_1^2 c_0 + p_1 f_1)^2 - 4(1 + p_1 + p_1^2) \times \right. \\ \left. \times (b_0^2 + p_1^2 c_0^2 + p_1 f_1^2) \right)^{1/2} / (2 + 2p_1 + 2p_1^2),$$

$$\text{где } p_1 = \sqrt[3]{\frac{-2p - 3f_1 - 3\sqrt{f_1^2 - 4f_2}}{-2p - 3f_1 + 3\sqrt{f_1^2 - 4f_2}}};$$

$$b_0 = (f_1 + \sqrt{f_1^2 - 4f_2}) / 2; \quad c_0 = (f_1 - \sqrt{f_1^2 - 4f_2}) / 2,$$

Таблица 1.2 – Виды закрепления концов трубы и граничные условия

Условие закрепления концов трубы	Графическое представление	Граничные условия	Определитель G_i
1. Шарнирное опирание		$u(0)=u''(0)=0$ $=u(1)=u''(1)=0$	G_1
2. Зажатый-зажатый		$u(0)=u'(0)=0$ $=u(1)=u'(1)=0$	G_2
3. Зажатый-свободный (консольный)		$u(0)=u'(0)=0$ $=u''(1)=u'''(1)=0$	G_3
4. Свободные концы		$u''(0)=u'''(0)=0$ $=u''(1)=u'''(1)=0$	G_4

Здесь

$$G_1 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1^2 & k_2^2 & k_3^2 & k_4^2 \\ e^{k_1} & e^{k_2} & e^{k_3} & e^{k_4} \\ k_1^2 e^{k_1} & k_2^2 e^{k_2} & k_3^2 e^{k_3} & k_4^2 e^{k_4} \end{vmatrix}, \quad G_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ e^{k_1} & e^{k_2} & e^{k_3} & e^{k_4} \\ k_1 e^{k_1} & k_2 e^{k_2} & k_3 e^{k_3} & k_4 e^{k_4} \end{vmatrix},$$

$$G_3 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ k_1^2 e^{k_1} & k_2^2 e^{k_2} & k_3^2 e^{k_3} & k_4^2 e^{k_4} \\ k_1^3 e^{k_1} & k_2^3 e^{k_2} & k_3^3 e^{k_3} & k_4^3 e^{k_4} \end{vmatrix}, \quad G_4 = \begin{vmatrix} k_1^2 & k_2^2 & k_3^2 & k_4^2 \\ k_1^3 & k_2^3 & k_3^3 & k_4^3 \\ k_1^2 e^{k_1} & k_2^2 e^{k_2} & k_3^2 e^{k_3} & k_4^2 e^{k_4} \\ k_1^3 e^{k_1} & k_2^3 e^{k_2} & k_3^3 e^{k_3} & k_4^3 e^{k_4} \end{vmatrix}.$$

$$f_1 = \frac{-4p(2pr + q^2) - 9(-2p(2pr + q^2) - 16r^2)}{p^2 + 12(2pr + q^2)};$$

$$f_2 = \frac{16(2pr + q^2)^2 - 3p(-2p(2pr + q^2) - 16r^2)}{p^2 + 12(2pr + q^2)},$$

и выбрав действительный корень ξ_k [5], находим решение уравнения (1.4)

$$k_1 = (R_1 + D_1) / 2; \quad k_2 = (R_1 - D_1) / 2;$$

$$k_3 = (-R_1 + E_1) / 2; \quad k_4 = (-R_1 - E_1) / 2;$$

где

$$R_1 = \sqrt{-p + \xi_k},$$

$$D_1 = \begin{cases} \sqrt{-R_1^2 - 2p - 2iq / R_1}, & R_1 \neq 0; \\ \sqrt{-2p + 2\sqrt{\xi_k^2 - 4r}}, & R_1 = 0; \end{cases}$$

$$E_1 = \begin{cases} \sqrt{-R_1^2 - 2p + 2iq / R_1}, & R_1 \neq 0; \\ \sqrt{-2p - 2\sqrt{\xi_k^2 - 4r}}, & R_1 = 0. \end{cases}$$

Для решения поставленной задачи произведем численный расчет до тех пор, пока будет выполнено условие (с необходимой точностью) $G \cdot \bar{G} = 0$, а также уточняем корни уравнений (1.4) и (1.5) по методу Ньютона.

При $N = 1$ уравнение (1.2) допускает факторизацию, и тогда вековое уравнение можно записать в виде [2]:

$$\gamma \delta (ch \gamma \cos \delta - \cos \alpha) - \alpha^2 sh \gamma \sin \delta / 4 = 0, \quad \omega > \alpha^2 / 4;$$

$$\gamma_* \delta (\cos \gamma_* \cos \delta - \cos \alpha) - \alpha^2 \sin \gamma_* \sin \delta / 4 = 0, \quad 0 \leq \omega \leq \alpha^2 / 4;$$

где

$$\gamma = \sqrt{\omega - \alpha^2 / 4}, \quad \delta = \sqrt{\omega + \alpha^2 / 4}, \quad \gamma_* = -i\gamma.$$

2 Примеры расчета

Для тестирования методики использовались численные данные, приведенные в работе [2]: на рисунке 2.1 изображены графики зависимости первой собственной частоты ω от скоростного параметра α (график 1 – по предложенной методике, график 2 – из статьи [2]).

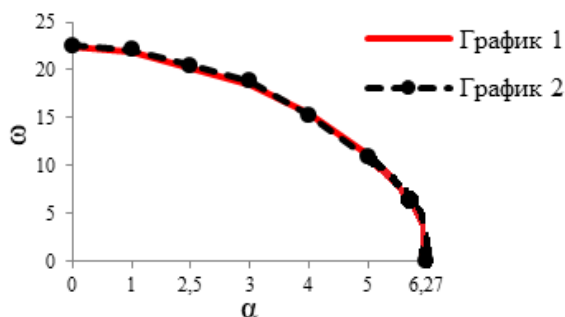


Рисунок 2.1 – Графики зависимостей ω от α

На рисунках 2.2 и 2.3 показаны графики влияния длины (рисунок 2.2, а), толщины трубы (рисунок 2.2, б) и плотности жидкости внутри трубы при различных %-ных содержаниях волокон в матрице материала трубы (рисунок 2.3, а) на первую собственную частоту ω и скоростной параметр α . На рисунке 2.3, б, показан график зависимости первой собственной частоты ω от %-го содержания волокон в матрице материала трубы при различных условиях закрепления концов трубы. Приняты следующие характеристики: $L = 1$ м; $v_0 = 10$ м/с; $R = 0,1$ м; $\delta R = 0,01$ м; $\rho_2 = 1000$ кг/м³; $E_a = 200 \cdot 10^9$ Н/м²; $v_a = 0,25$; $\rho_a = 5000$ кг/м³; $E_m = 600 \cdot 10^9$ Н/м²; $v_m = 0,23$; $\rho_m = 8000$ кг/м³. Модуль упругости E , коэффициент Пуассона ν и плотность ρ материала трубы определялись по правилу смесей [1]:

$$E = VE_a + (1 - V)E_m,$$

$$\nu = V\nu_a + (1 - V)\nu_m,$$

$$\rho_1 = V\rho_a + (1 - V)\rho_m,$$

нижние индексы a и m характеризуют волокно и матрицу материала трубы соответственно; V – объемное содержание волокна в матрице композиционного материала.

Следует отметить, что разработанный алгоритм для нахождения собственных частот с различными граничными условиями закрепления можно применить для расчета микротрубок, когда транспортируется жидкость, и функционально-градиентный материал для стенки трубы постоянно изменяется по толщине микротрубки по степенному закону распределения. Так, например, в работе [3] предложен метод решения подобных задач и приводится пример расчета со следующими параметрами для микротрубки с ФГМ: отношение внутреннего диаметра к внешнему диаметру $D_i / D_0 = 0,9$, $D_0 = 20$ мкм, длина $L = 17,6$ мкм, плотность жидкости $\rho_2 = 1000$ кг/м³, модули упругости $E_c = 380$ ГПа, $E_m = 70$ ГПа, коэффициенты Пуассона $\nu_c = \nu_m = 0,23$, плотности материала трубы $\rho_c = 3800$ кг/м³, $\rho_m = 2700$ кг/м³. Проведенные вычисления показали, что как макроуровне, так и на микроуровне [3] критические скорости увеличиваются с увеличением показателя объемной доли s , и собственная частота уменьшается с увеличением параметра масштаба длины.

На рисунках 2.4. а, и 2.4. б, показаны графики зависимостей ω и α для трубы из функционально-градиентного материала при различных значениях коэффициента степени s и условиях закрепления концов трубы (сосуда). Начальные данные соответствуют [3].

Следует отметить, что способы закрепления концов трубопровода значительно влияют на значения собственных колебаний, что отражено

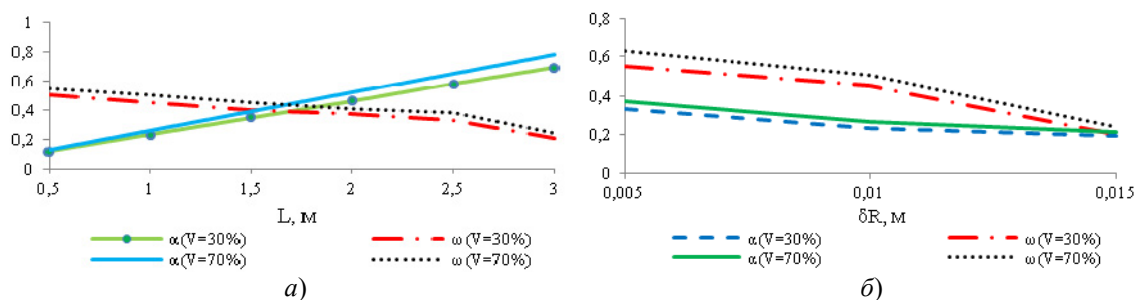


Рисунок 2.2 – Графики зависимостей ω и α от длины (a) и толщины трубы (б)

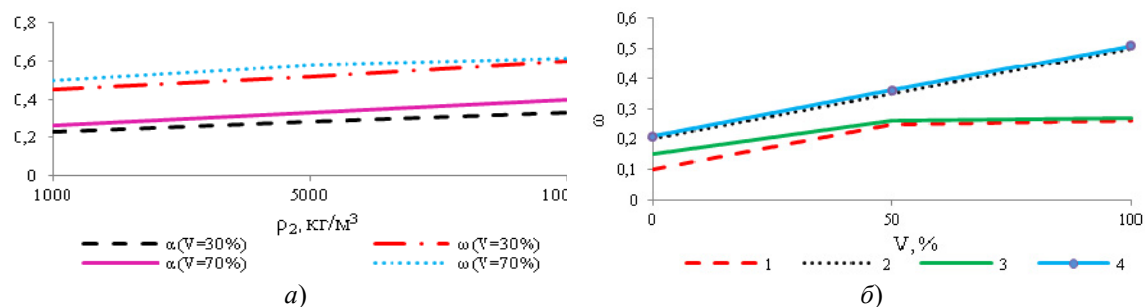


Рисунок 2.3 – Графики зависимостей ω и α от плотности транспортируемой жидкости (a) и условий закрепления концов трубы (б)

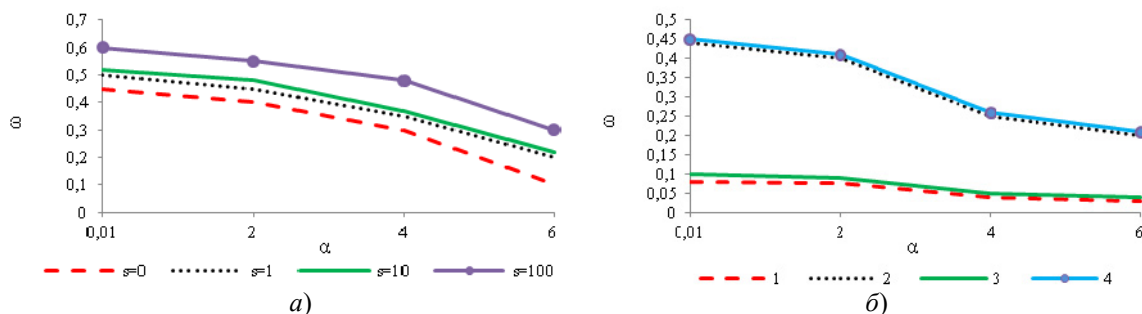


Рисунок 2.4 – Графики зависимостей ω от α для трубы из ФГМ при различных коэффициентах степени s (a), способах закрепления концов трубы (б)

на рисунках 2.3, б, и 2.4, б: значения 1, 2, 3, 4 соответствуют нумерации условий закрепления концов трубы в таблице 1.2. В тоже время можно заметить, что собственные частоты для крепления 2 (жесткое защемление) и 4 (свободные концы) совпадают, как это видно из рисунков 2.3, б, и 2.4, б, это свойство вытекает из теоремы 2 работы [2] и связи определителей G_2 и G_4 . При $\alpha = 0$ собственные колебания ω принимают максимальные значения [2].

Заключение

Разработана методика реализации математической модели расчета собственных колебаний трубопровода (сосуда) из композитов, включая функционально-градиентные материалы. Используя современные достижения по решению подобных задач рассматриваемого типа как на макроуровне, так и на микроуровне [2], [3] построен алгоритм, который обобщает разработанные решения в виде определенного эффективного

подхода математической реализации расчета. Особенность представленного алгоритма заключается в применении известной методики решения кубического уравнения и, при необходимости, уточнении корней по методу Ньютона. Как показали проведенные расчеты, собственные частоты исследуемых конструкций труб (сосудов) зависят от условий крепления их концов и физических свойств материалов. Тестирование методики проводилось для первой собственной частоты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Можаровский, В.В. Прикладная механика слоистых тел из композитов / В.В. Можаровский, В.Е. Старжинский. – Минск: Наука и техника, 1988. – 280 с.
2. Акуленко, Л.Д. Основные свойства собственных колебаний протяженного участка трубопровода / Л.Д. Акуленко, М.И. Иванов, Л.И. Коровина // Механика твердого тела. – 2013. – № 4. – С. 119–134.

3. *Talib, E.H.* Semi-analytic solution for stability and free vibration of functionally graded (FG) material micro-pipe conveying fluid / E.H. Elaikh Talib, Nada M. Abed // International journal of energy and environment. – 2018. – Vol. 9, iss. 6. – P. 563–580.

4. *Хакимов, А.Г.* Определение скорости движущегося стержня и толщины покрытия по собственным частотам изгибных колебаний / А.Г. Хакимов // Труды института механики имени Р.Р. Мавлютова. – 2016. – Т. 1, № 1. – С. 10–15.

5. *Wein, Ron.* High-level filtering for arrangements of conic arcs / Ron Wein // Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the

M.Sc. degree in the School of Computer Science, Tel-Aviv University. – 2002. – 76 p.

6. *Raghavendra, Dr.* Unified method for solving general polynomial equations of degree less than five / Dr. Raghavendra, G. Kulkarni // Alabama Journal of Mathematics. – 2006. – P. 1–18.

Поступила в редакцию 08.09.2022.

Информация об авторах

Можаровский Валентин Васильевич – д.т.н., профессор
Киргинцева Светлана Викторовна – ассистент

УДК 539.12.01

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_43

EDN: LRXSGO

**ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ
ЛОГУНОВА – ТАВХЕЛИДЗЕ С НЕКОТОРЫМИ АНАЛОГАМИ
ПОТЕНЦИАЛА ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА
В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ**

А.В. Павленко, Ю.А. Гришечкин

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

**EXACT SOLUTIONS OF THE TWO-DIMENSIONAL
LOGUNOV – TAVKHELIDZE EQUATION WITH SOME ANALOGUES
OF THE HARMONIC OSCILLATOR POTENTIAL
IN THE MOMENTUM REPRESENTATION**

A.V. Paulenko, Yu.A. Grishechkin

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Получены точные решения двумерного уравнения Логунова – Тавхелидзе, описывающего связанные состояния систем двух скалярных частиц одинаковой массы для некоторых вариантов релятивистского обобщения потенциала гармонического осциллятора в импульсном представлении.

Ключевые слова: двумерное уравнение Логунова – Тавхелидзе, парциальная волновая функция, связанные состояния, гармонический осциллятор, двумерное импульсное представление.

Для цитирования: Павленко, А.В. Точные решения двумерного уравнения Логунова – Тавхелидзе с некоторыми аналогами потенциала гармонического осциллятора в импульсном представлении / А.В. Павленко, Ю.А. Гришечкин // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 43–45. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_43. – EDN: LRXSGO

Abstract. The exact solutions of the two-dimensional Logunov-Tavkhelidze equation which describes the bound states of systems of two scalar particles of the equivalent mass for some variants of the relativistic generalization of the harmonic oscillator potential are obtained in the momentum representation.

Keywords: two-dimensional Logunov – Tavkhelidze equation, partial wave function, bound states, harmonic oscillator, two-dimensional momentum representation.

For citation: Paulenko, A.V. Exact solutions of the two-dimensional Logunov – Tavkhelidze equation with some analogues of the harmonic oscillator potential in the momentum representation / A.V. Paulenko, Yu.A. Grishechkin // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 43–45. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_43 (in Russian). – EDN: LRXSGO

Введение

Рассмотрим уравнение Логунова – Тавхелидзе для системы двух скалярных частиц одинаковой массы m в двумерном импульсном представлении

$$\begin{aligned} (E^2 - m^2 - \mathbf{p}^2) \psi(\mathbf{p}) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^2} \int V(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \frac{m}{E_k} d^2\mathbf{k}, \\ E_k = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}, \end{aligned} \quad (0.1)$$

где \mathbf{p} – двумерный относительный импульс в системе центра масс, $2E$ – энергия двухчастичной системы, $\psi(\mathbf{p})$ – волновая функция, $V(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ – релятивистский потенциал.

В нерелятивистской квантовой механике потенциал гармонического осциллятора в двумерном координатном представлении имеет вид

$$V(\rho) = \omega^2 \rho^2, \quad (0.2)$$

где ω – константа связи, $\rho \geq 0$ – модуль радиус-вектора. Используя преобразование Фурье, запишем потенциал (0.2) в двумерном импульсном представлении

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = -(2\pi)^2 \omega^2 \Delta_p^{(2)} \delta^{(2)}(\mathbf{p} - \mathbf{k}), \quad (0.3)$$

где $\Delta_p^{(2)}$ – оператор Лапласа на плоскости импульсов, $\delta^{(2)}(\mathbf{p} - \mathbf{k})$ – двумерная дельта-функция.

В следующих разделах мы рассмотрим некоторые аналоги потенциала (0.3) и найдем точные решения уравнения (0.1) с этими потенциалами. Отметим, что в трехмерном случае данная задача была решена в работе [1].

1 Релятивистские аналоги потенциала гармонического осциллятора

Преобразуем выражение (0.3), заменив в нём разность импульсов $\mathbf{p}-\mathbf{k}$ в евклидовом пространстве на разность $\mathbf{p}(-)\mathbf{k}$, заданную в пространстве Лобачевского [2]:

$$\mathbf{p}(-)\mathbf{k} = \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{m} \left[E_p - \frac{\mathbf{p}\mathbf{k}}{E_k + m} \right],$$

$$E_p = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}. \quad (1.1)$$

В результате получим потенциал следующего вида:

$$V_1(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = -(2\pi)^2 \omega^2 \Delta_p^{(2)} \left[\delta^{(2)}(\mathbf{p}(-)\mathbf{k}) \right] =$$

$$= -(2\pi)^2 \omega^2 \Delta_p^{(2)} \left[\frac{E_p}{m} \delta^{(2)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \right]. \quad (1.2)$$

При получении выражения (1.2) была использована формула преобразования дельта-функции аргумента $\mathbf{p}(-)\mathbf{k}$, приведенная в работе [2].

Следуя работе [1], умножим потенциал (0.3) на отношения E_k/E , E_p/E и таким образом получим еще два варианта потенциала:

$$V_2(E, \mathbf{p}, \mathbf{k}) = -(2\pi)^2 \omega^2 \frac{E_k}{E} \Delta_p^{(2)} \delta^{(2)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \quad (1.3)$$

и

$$V_3(E, \mathbf{p}, \mathbf{k}) = -(2\pi)^2 \omega^2 \frac{E_p}{E} \Delta_p^{(2)} \delta^{(2)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \quad (1.4)$$

соответственно. Нетрудно видеть, что на энергетической поверхности $E_k = E_p = E$ потенциалы (1.3) и (1.4) преобразуются в выражение (0.3). Нахождение нерелятивистского предела (предела при $m \rightarrow \infty$) формул (1.2)–(1.4) приводит к потенциалу (0.3). Таким образом, выражения (1.2)–(1.4) можно рассматривать в качестве релятивистских обобщений квантовомеханического потенциала гармонического осциллятора.

2 Точные решения двумерного уравнения Логанова – Тавхелидзе

Подстановка потенциалов (1.2)–(1.4) в уравнение (0.1) и последующее интегрирование с учетом свойств дельта-функции [3] приводит к следующим дифференциальным уравнениям в частных производных:

$$(E^2 - m^2 - p^2) \psi_1(\mathbf{p}) = -\omega^2 \Delta_p^{(2)} \psi_1(\mathbf{p}), \quad (2.1)$$

$$(E^2 - m^2 - p^2) \psi_2(\mathbf{p}) = -\frac{m}{E} \omega^2 \Delta_p^{(2)} \psi_2(\mathbf{p}), \quad (2.2)$$

$$(E^2 - m^2 - p^2) \psi_3(\mathbf{p}) = -\frac{E_p}{E} \omega^2 \Delta_p^{(2)} \frac{m}{E_p} \psi_3(\mathbf{p}), \quad (2.3)$$

где $p = |\mathbf{p}|$, а индекс волновой функции равен индексу соответствующего потенциала. Решение данных уравнений будем искать методом разделения переменных в полярных координатах

(p, φ) , представив искомые волновые функции в форме ($s = 1, 2, 3$) [4]

$$\psi_s(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \psi_{s,\mu}(p) \exp(i\mu\varphi), \quad (2.4)$$

где $\psi_{s,\mu}(p)$ – парциальные волновые функции. Подстановка ряда (2.4) в уравнения (2.1)–(2.3) и последующее приравнивание коэффициентов при экспонентах с одинаковыми показателями приводит к обыкновенным дифференциальным уравнениям для парциальных волновых функций:

$$\left(\frac{d^2}{dp^2} + \frac{1/4 - \mu^2}{p^2} + \frac{1}{\omega^2} (E^2 - m^2) - \frac{1}{\omega^2} p^2 \right) \times$$

$$\times \psi_{1,\mu}(p) = 0, \quad (2.5)$$

$$\left(\frac{d^2}{dp^2} + \frac{1/4 - \mu^2}{p^2} + \frac{E}{m\omega^2} (E^2 - m^2) - \frac{E}{m\omega^2} p^2 \right) \times$$

$$\times \psi_{2,\mu}(p) = 0, \quad (2.6)$$

$$\left(\frac{d^2}{dp^2} + \frac{1/4 - \mu^2}{p^2} + \frac{E}{m\omega^2} (E^2 - m^2) - \frac{E}{m\omega^2} p^2 \right) \times$$

$$\times \frac{1}{E_p} \psi_{3,\mu}(p) = 0. \quad (2.7)$$

Отметим, что уравнение (2.7) может быть сведено к уравнению (2.6) путем замены $\psi_{3,\mu}(p) = E_p \psi_{2,\mu}(p)$. Регулярные на интервале $p \in [0; \infty)$ решения уравнений (2.5)–(2.7) имеют следующий вид [5]:

$$\psi_{1,\mu}(p) = C_{1,\mu} p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \times$$

$$\times \exp\left(-\alpha \frac{p^2}{2}\right) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{4} + \frac{|\mu|}{2}, |\mu| + 1, \alpha p^2\right),$$

$$\alpha = \frac{1}{\omega}, \quad (2.8)$$

$$\psi_{2,\mu}(p) = C_{2,\mu} p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \times$$

$$\times \exp\left(-\alpha \frac{p^2}{2}\right) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{4} + \frac{|\mu|}{2}, |\mu| + 1, \alpha p^2\right),$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}},$$

$$\psi_{3,\mu}(p) = C_{3,\mu} E_p p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \times$$

$$\times \exp\left(-\alpha \frac{p^2}{2}\right) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{4} + \frac{|\mu|}{2}, |\mu| + 1, \alpha p^2\right),$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}},$$

где $\beta = \alpha(E^2 - m^2)$, $C_{s,\mu}$ – неизвестные константы, ${}_1F_1(a, b, x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция [6].

Для того чтобы волновые функции (2.8) были конечными при любых значениях переменной p , следует потребовать выполнения условия

$$1/2 - \beta/4 + |\mu|/2 = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

Наличие условия (2.9) приводит к тому, что вырожденная гипергеометрическая функция в формулах (2.8) преобразуется в обобщенный полином Лагерра [6]. Таким образом, парциальные волновые функции для фиксированного состояния n могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{1,\mu,n}(p) &= \\ &= C_{1,\mu,n} p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \exp\left(-\frac{1}{\omega} \frac{p^2}{2}\right) L_n^{|\mu|}\left(\frac{1}{\omega} p^2\right), \quad (2.10) \\ \Psi_{2,\mu,n}(p) &= \\ &= C_{2,\mu,n} p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \exp\left(-\sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \frac{p^2}{2}\right) L_n^{|\mu|}\left(\sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} p^2\right), \\ \Psi_{3,\mu,n}(p) &= \\ &= C_{3,\mu,n} E_p p^{\frac{1}{2}+|\mu|} \exp\left(-\sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \frac{p^2}{2}\right) L_n^{|\mu|}\left(\sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} p^2\right). \end{aligned}$$

Учитывая обозначения, введенные в (2.8), получим из равенства (2.9) условия квантования энергии системы двух частиц для каждого из трех потенциалов:

– потенциала (1.2)

$$2E_n = 2\sqrt{2\omega(2n + |\mu| + 1) + m^2}, \quad (2.11)$$

– потенциалов (1.3) и (1.4)

$$\sqrt{E_n}(E_n^2 - m^2) = 2\omega\sqrt{m}(2n + |\mu| + 1). \quad (2.12)$$

Для определения констант $C_{s,\mu,n}$ мы использовали нерелятивистское условие нормировки парциальных волновых функций

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \Psi_{s,\mu,n}^2(p) dp = 1. \quad (2.13)$$

Подстановка волновых функций (2.10) в равенство (2.13) и последующее вычисление интегралов [7] приводим к следующим значениям констант:

$$\begin{aligned} C_{1,\mu,n} &= \left(\frac{4\pi\omega^{-\mu-1}n!}{(|\mu|+n)!} \right)^{1/2}, \\ C_{2,\mu,n} &= \left(\frac{4\pi \left[E_n / (m\omega^2) \right]^{\frac{|\mu|+1}{2}} n!}{(|\mu|+n)!} \right)^{1/2}, \\ C_{3,\mu,n} &= \left(\frac{4\pi \left[E_n / (m\omega^2) \right]^{\frac{|\mu|+1}{2}} n!}{\left(\sqrt{m\omega^2/E_n} (2n + |\mu| + 1) + m^2 \right) (n + |\mu|)!} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Отметим, что использование релятивистского условия нормировки волновой функции [8] не дает возможность получить точные выражения для констант $C_{s,\mu,n}$.

Заключение

Таким образом, в данной работе найдены точные решения двумерного уравнения Логанова – Тавхелидзе с некоторыми аналогами потенциала гармонического осциллятора в импульсном представлении: парциальные волновые функции и условия квантования энергии.

В дальнейшем мы планируем рассмотреть другие варианты релятивистского обобщения потенциала гармонического осциллятора и получить точные или приближенные решения релятивистских двухчастичных уравнений с этими типами взаимодействий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Капшай, В.Н. Точные решения квазипотенциальных уравнений для некоторых аналогов потенциалов заперяния / В.Н. Капшай, С.П. Кулешов, Н.Б. Скачков // Ядерная физика. – 1983. – Т. 37. – С. 1292–1296.
2. Кадышевский, В.Г. Трехмерная формулировка релятивистской проблемы двух тел / В.Г. Кадышевский, Р.М. Мир-Касимов, Н.Б. Скачков // ЭЧАЯ. – 1972. – Т. 2, № 3. – С. 635–690.
3. Владимиров, В.С. Обобщенные функции в математической физике / В.С. Владимиров // Изд. 2-е, испр. и дополн. Серия: «Современные физико-технические проблемы». – Москва: Наука, 1979. – 320 с.
4. Бабиков, В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике / В.В. Бабиков. – Москва: Наука, 1976. – 285с.
5. Камке, Э. Справочник по дифференциальным уравнениям / Э. Камке. – Санкт-Петербург: Лань, 2003. – 576 с.
6. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям с формулами графиками и математическими таблицами / М. Абрамовиц, И. Стиган. – Москва: Наука, 1979. – 830 с.
7. Градштейн, И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и производных / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик; изд-е 7-е. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 1232 с.
8. Гришечкин, Ю.А. Численные решения задач о связанных состояниях и состояниях рассеяния для потенциалов однозонного обмена и их суперпозиций: практическое руководство / Ю.А. Гришечкин, В.Н. Капшай; М-во образования Республики Беларусь, Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2018. – 38 с.

Поступила в редакцию 02.11.2022.

Информация об авторах

Гришечкин Юрий Алексеевич – к.ф.-м.н., доцент
Павленко Андрей Васильевич – аспирант

МОРФОЛОГИЯ И СТРУКТУРА НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ФОРМИАТ СВИНЦА

А.С. Руденков, М.А. Ярмоленко

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

MORPHOLOGY AND STRUCTURE OF NANOCOMPOSITE POLYMER COATINGS CONTAINING LEAD FORMATE

A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Определены особенности влияния природы полимерной матрицы на морфологию и структуру наноконпозиционных покрытий, сформированных лазерным диспергированием смеси полимеров и формиата свинца. Установлено влияние полярности полимера, термообработки на распределение отдельных структурных образований покрытий, ширину запрещенной зоны металлсодержащего наполнителя. Показано, что природа полимерного материала не оказывает заметного влияния на процесс разложения формиата свинца под действием лазерного излучения.

Ключевые слова: полимерные покрытия, свинец, формиат, политетрафторэтилен, поликапролактан, фторопласт-30, морфология, структура.

Для цитирования: Руденков, А.С. Морфология и структура наноконпозиционных полимерных покрытий, содержащих формиат свинца / А.С. Руденков, М.А. Ярмоленко // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 46–52. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_46. – EDN: OQAGKV

Abstract. The features of the influence of the polymer matrix nature on the morphology and structure of nanocomposite coatings formed by laser dispersion of a mixture of polymers and lead formate are determined. The influence of polymer polarity, heat treatment on the distribution of individual structural formations of coatings, the band gap of a metal-containing filler has been established. The nature of the polymeric material does not significantly affect the process of electron-beam decomposition of lead formate.

Keywords: polymer coatings, lead, formate, polytetrafluoroethylene, polycaprolactan, fluoroplast-30, morphology, structure.

For citation: Rudenkov, A.S. Morphology and structure of nanocomposite polymer coatings containing lead formate / A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 46–52. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_46 (in Russian). – EDN: OQAGKV

Введение

В настоящее время наноконпозиционные покрытия, благодаря уникальным механическим, физико-химическим, электрофизическим и оптическим свойствам, широко используются при решении различных задач науки и техники [1]–[7]: разработка биомедицинских сенсоров на основе металлоорганики (в том числе для определения COVID-19 [3]); модифицирование поверхности медицинских имплантатов с целью придания антибактериальных свойств [4], [5]; повышение коррозионной стойкости и улучшение триботехнических характеристик поверхности [6]; разработка и производство элементов электронной техники [7] и др.

Полимерные наноконпозиционные покрытия представляют собой полимерную матрицу, содержащую различные химические элементы или наноструктуры, чаще всего это оксиды металлов и углеродные наночастицы [4], [5], [8]. Свойства таких покрытий существенным образом зависят от метода формирования, природы матрицы и

наполнителя, размеров допирующих наноструктур [8], [9]. Например, модуль упругости полимерных наноконпозитов в зависимости от диаметра углеродных нанотрубок может варьироваться от 300 ГПа до 1 ТПа [9]. Кроме того, большое влияние на свойства наноконпозиционных покрытий оказывает распределение наноструктур по объему [10]. Агрегация наночастиц в полимерной матрице может приводить к снижению эффективности допирования [8]. Еще одним из немаловажных факторов является взаимодействие наполнителя и полимера, зависящее от числа адсорбированных участков полимерных цепочек и от площади контакта наноструктур и матрицы [11]. Площадь контакта, в свою очередь, определяется формой и ориентацией допирующих наноструктур.

Таким образом, исследования, направленные на разработку методом формирования наноконпозиционных покрытий с заданным распределением наполнителя по объему, а также работы, посвященные изучению взаимодействия

наноструктур и матрицы, представляют научный и практический интерес.

Целью настоящей работы является изучение процессов формирования и определение влияния природы полимерной матрицы на морфологию и структуру нанокomпозиционных покрытий, сформированных лазерным диспергированием формиата свинца и его смеси с полимерами, отличающимися степенью полярности макромолекул.

1 Методика эксперимента

Экспериментальные образцы нанокomпозиционных полимерных покрытий были сформированы на кремниевой подложке путем лазерного диспергирования композиционной мишени формиата свинца $Pb(HCOO)_2$. В качестве матрицы были выбраны следующие полимерные материалы: политетрафторэтилен (ПТФЭ), фторопласт-30, микрокристаллическая целлюлоза (МКЦ), нанокристаллическая целлюлоза (НКЦ), поликапролактан. Соотношение компонентов в мишени (полимер-формиат свинца) – 1:1. При формировании покрытий использовался лазер L-2137U+HG-5 с длиной волны 532 нм, длительностью импульса накачки в режиме модулированной добротности 6 нс, энергией импульса накачки 43 мДж и энергией лазерного импульса 450 мДж.

Молекулярная структура покрытий была определена с помощью инфракрасного (ИК) Фурье спектрофотометра Vertex-70 (Bruker) (диапазон сканирования $4000\text{--}300\text{ см}^{-1}$, разрешение 4 см^{-1}). В качестве внутреннего стандарта были приняты спектры углеводородных покрытий по полосе C – H при 1465 см^{-1} .

Значение ширины запрещенной зоны было установлено на основании анализа электронных спектров поглощения, получаемых с помощью спектрофотометра Cary-50 (Varian, США) согласно модели Таунца [12].

Морфология композиционных покрытий была изучена средствами атомно-силовой микроскопии (АСМ) при помощи микроскопа Solver Pro (NT-MDT, Москва, Россия). Режим работы – полуконтактный, область сканирования – 4×4 мкм. Для анализа полученных результатов был использован специализированный программный комплекс Gwyddion. Указанный комплекс позволяет определить: Rms – параметр оценки рельефа поверхности, вычисляемый как корень квадратный из среднего квадрата расстояний вершин неровностей профиля до его средней линии; R_a – среднее арифметическое отклонение всех точек профиля шероховатости от средней линии на длине оценки; среднюю высоту; распределение по размеру; количество и диаметр отдельных структурных образований – зерен.

2 Результаты и их обсуждение

Процесс лазерного диспергирования формиата свинца условно можно разделить на два временных периода: начальный и заключительный. В начальный период воздействия лазерного излучения на соль происходит интенсивное газообразование (рисунок 2.1). Рост давления в вакуумной камере является результатом разложения соли. Разложение сопровождается постепенным изменением цвета порошка соли от белого до серого. В отмеченный период времени кварцевый измеритель толщины фиксирует лишь незначительную скорость осаждения. После того, как мишень полностью становится серой и начинает плавиться, происходит заметное снижение давления в вакуумной камере. Именно на заключительной стадии диспергирования фиксируется максимальная скорость осаждения.

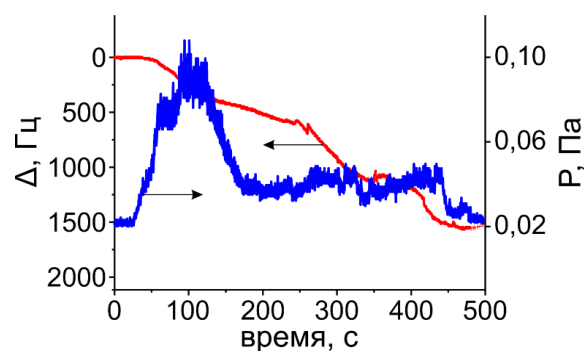


Рисунок 2.1 – Кинетика роста покрытия и изменение давления в процессе лазерного диспергирования формиата свинца

На разложение формиата свинца указывает ИК-спектроскопический анализ материала мишени после воздействия на нее лазерного излучения (рисунок 2.2).

В ИК-спектре материала мишени после воздействия лазерного излучения отсутствует заметное поглощение в области $(1610\text{--}1550)\text{ см}^{-1}$ и $(1400\text{--}1300)\text{ см}^{-1}$, характерное для ионизированных карбоксильных групп [13]. Разложение формиата свинца приводит к образованию в мишени металла и его плавлению. По этой причине покрытие на основе формиата свинца в ИК-спектре не является активным.

Электронные спектры поглощения косвенно подтверждают вывод о деструкции (рисунок 2.3). Отметим, что значение ширины запрещенной зоны E_g для оксида свинца (II) $\approx 2,9\text{ эВ}$ [14]. Низкотемпературный отжиг не приводит к заметному окислению покрытия с образованием оксида. Влияние термообработки, по-видимому, проявляется в дополнительном разложении продуктов диспергирования формиата свинца. Смещение величины E_g с $4,46\text{ эВ}$ к $4,35\text{ эВ}$ может являться следствием укрупнения структурных элементов покрытия.

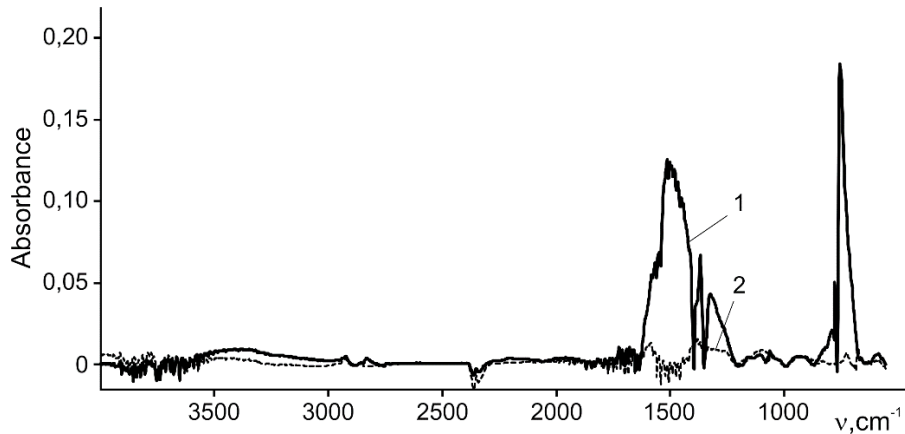


Рисунок 2.2 – ИК-спектры порошка формиата свинца до и после воздействия на него лазерного излучения: 1 – до; 2 – после

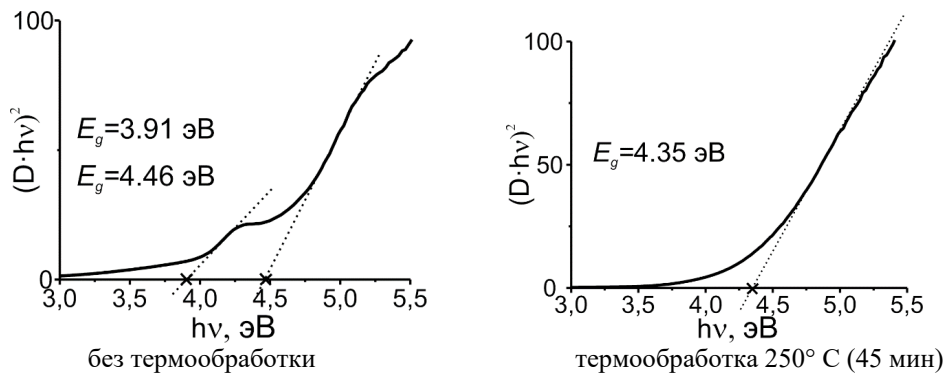


Рисунок 2.3 – Расчет значения E_g для покрытий на основе формиата свинца

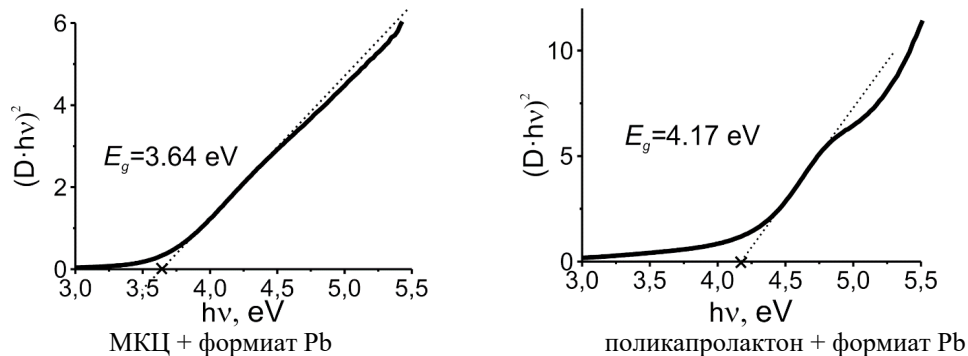


Рисунок 2.4 – Расчет значения E_g для нанокomпозиционных покрытий после термообработки (250° С, 45 мин)

В дальнейшем были рассмотрены электронные спектры композиционных покрытий на основе формиата свинца, микро- и нанокристаллической целлюлозы, поликапролактона после термической обработки. Следует отметить, что высокомолекулярные органические соединения в процессе термической обработки и под действием лазерного излучения способны претерпевать заметные структурные изменения [15]. Для композиционного покрытия на основе микрокристаллической целлюлозы и формиата свинца значение E_g равно 3,64 эВ (рисунок 2.4). Близкие значения фиксируются после низкотемпературного

отжига покрытий микрокристаллической целлюлозы. Согласно данным работы [15] термообработка слоя целлюлозы инициирует разрушение пиранозных циклов с образованием аморфных углеродных структур, которые также могут оказать влияние на значения E_g .

Для термообработанного композиционного слоя на основе поликапролактона и формиата свинца величина E_g равна 4,17 эВ. Снижение величины E_g может быть связано с взаимодействием металлического свинца с кислородными группами полимера.

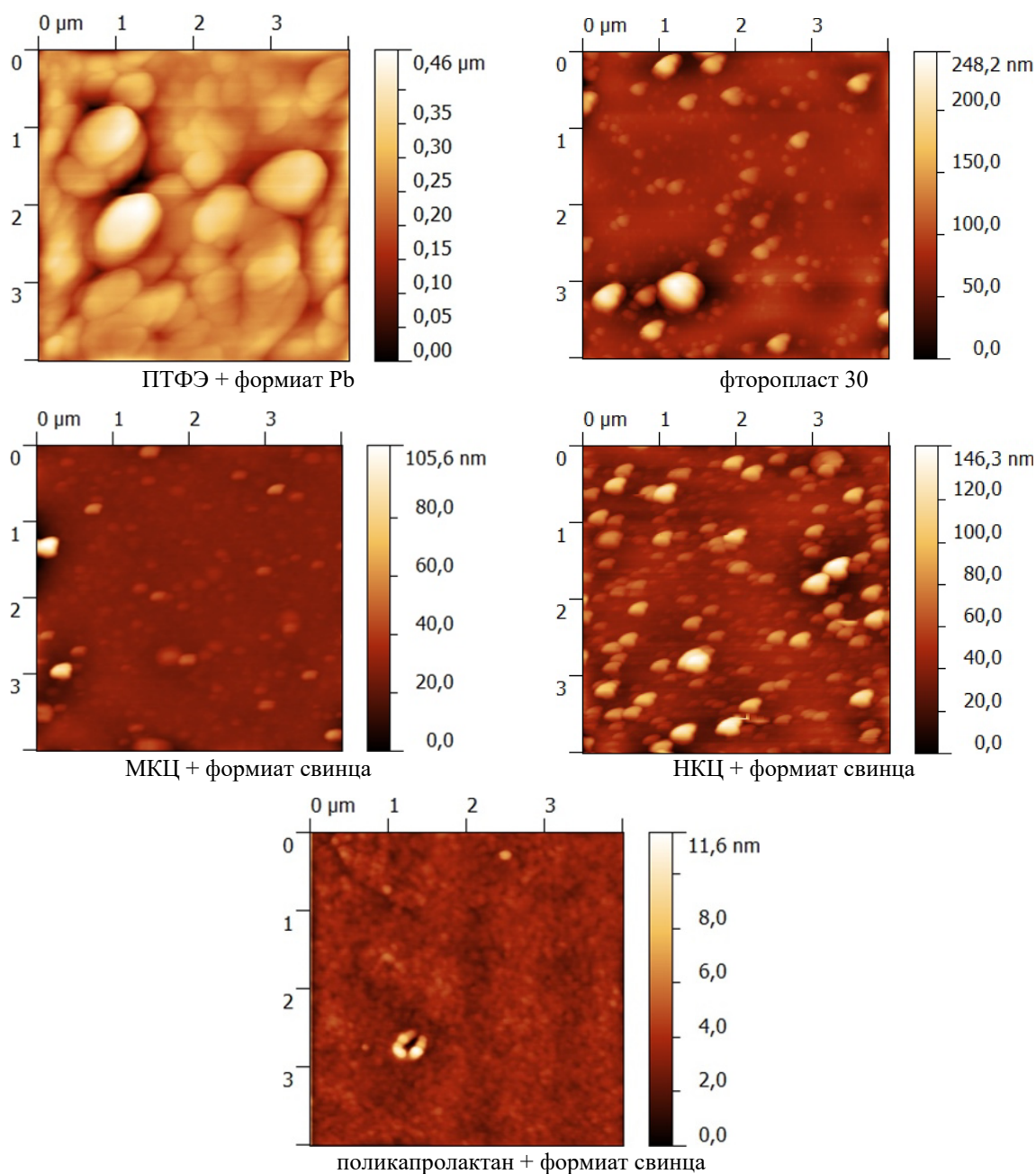


Рисунок 2.5 – АСМ изображения нанокomпозиционных полимерных покрытий, содержащих формиат свинца

Результаты АСМ свидетельствуют о том, что наиболее развитой морфологией обладают покрытия на основе поликапролактана и формиата свинца (рисунок 2.5). Данный факт обусловлен наименьшей температурой плавления среди рассматриваемых образцов. Покрытия на основе политетрафторэтилена, наоборот, характеризуются наибольшими субшероховатостью, размерами зерен и их наименьшим числом на площади сканирования (таблица 2.1), что объясняется отсутствием полярных групп, способных образовывать прочные химические связи со свинцом и формировать таким образом более латеральные структуры.

Покрытия на основе микроцеллюлозы и формиата свинца характеризуются менее развитой морфологией: относительно низкой субшероховатостью, относительно низкими значениями средней высоты отдельных структурных образований.

Приведенные выше выводы подтверждаются статистическим анализом распределения отдельных структурных образований по размерам (радиус эквивалентного диска) (рисунок 2.6).

Все полученные распределения, за исключением покрытий на основе политетрафторэтилена и формиата свинца, являются унимодальными, и большая часть зерен имеют диаметр менее 200 нм

(рисунок 2.6). Наибольшей дисперсностью и наименьшим отклонением по размерам отдельных структурных образований характеризуются покрытия на основе поликапролактана и формиата свинца.

Согласно результатам ИК-спектроскопии, присутствие в составе мишени полимерного компонента препятствует полному разложению формиата свинца в зоне воздействия лазерного излучения (рисунок 2.7).

Таблица 2.1 – Влияние природы полимерной матрицы на морфологию нанокomпозиционных покрытий, содержащих формиат свинца

Полимерная матрица	Средняя высота, нм	R_{av} , нм	R_{ms} , нм	Плотность зерен, шт.	Средний диаметр зерен, нм
Политетрафторэтилен	256,7	41,6	57,0	21	390,0
Фторопласт-30	87,1	12,4	21,2	109	116,7
Микроцеллюлоза	29,1	3,6	7,7	134	113,0
Наноцеллюлоза	68,9	12,5	18,3	123	144,0
Поликапролактан	3,41	1,2	1,6	243	80,0

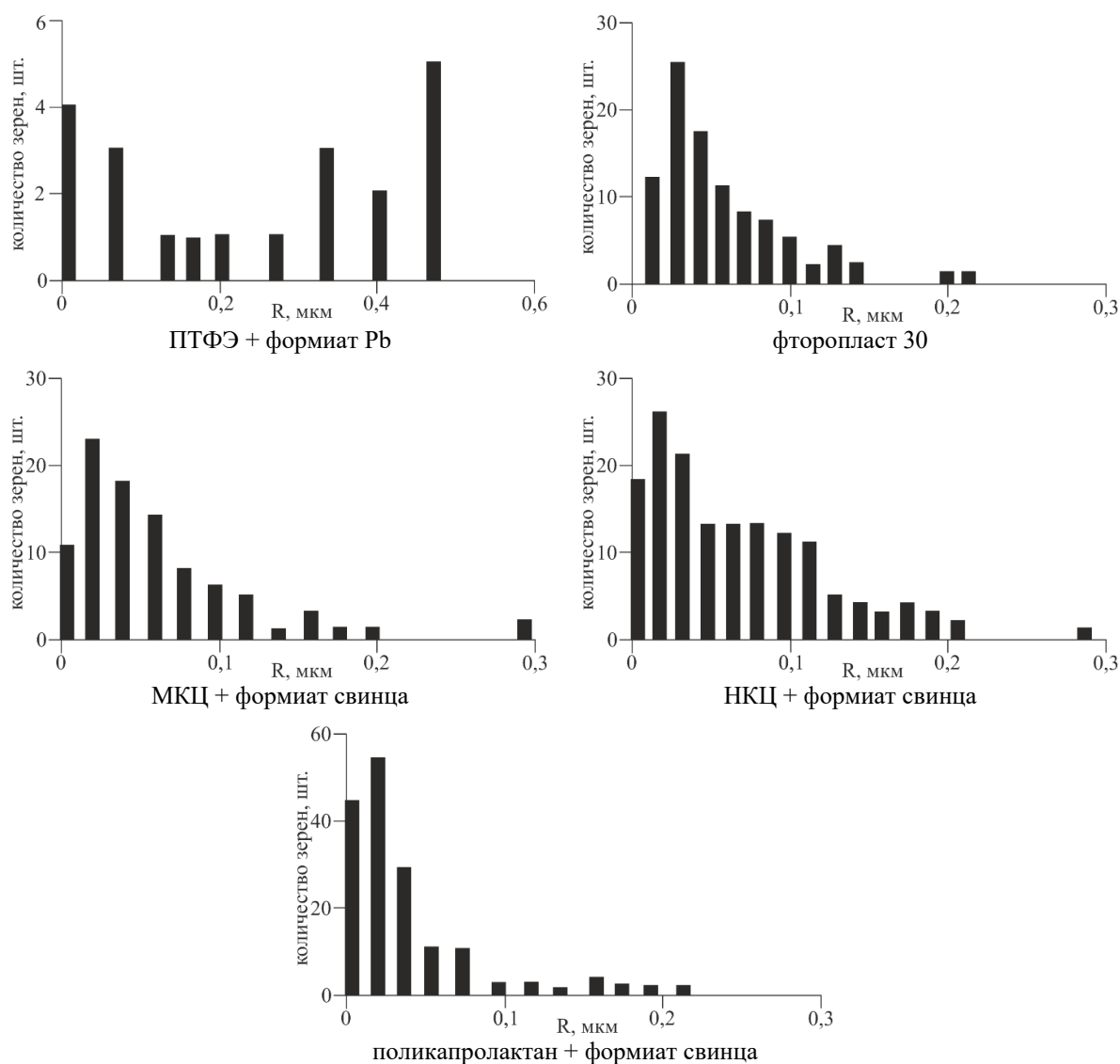
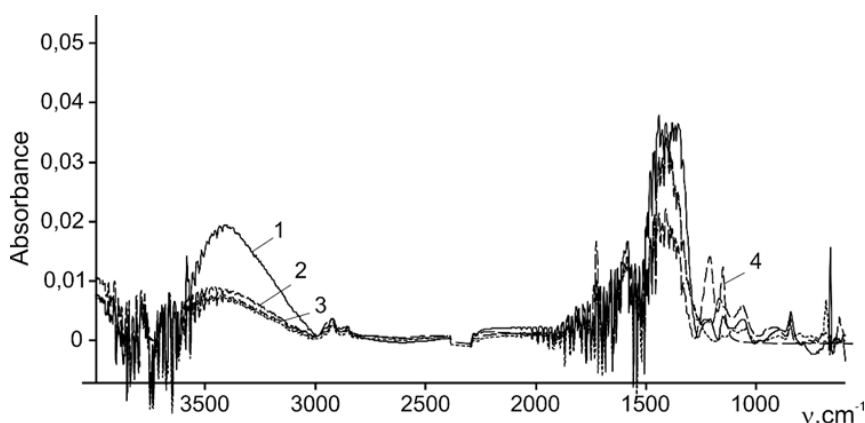


Рисунок 2.6 – Распределение отдельных структурных образований нанокomпозиционных полимерных покрытий, содержащих формиат свинца, по размерам



1 – фторопласт 30 + формиат свинца; 2 – поликапролактон + формиат свинца;
3 – МКЦ + формиат свинца; 4 – ПТФЭ + формиат свинца

Рисунок 2.7 – ИК-спектры композиционных покрытий на основе формиата свинца

В ИК-спектрах композиционных покрытий, независимо от природы полимерной матрицы, присутствует значительное количество неразложившейся соли. Поток летучих продуктов лазерного диспергирования полимерного материала захватывает частицы формиата свинца и переносит на подложку.

Выводы

Определены особенности влияния природы полимерного материала на процесс разложения формиата свинца под действием лазерного излучения, морфологию образующихся покрытий.

Показано, что наибольшей дисперсностью обладают покрытия на основе поликапролактана, что обусловлено наименьшей, среди рассматриваемых образцов, температурой плавления. Отсутствие полярных групп, способных образовывать прочные химические связи со свинцом, и наихудшая смачиваемость являются причинами низкой дисперсности и наибольшей субшероховатости покрытий на основе политетрафторэтилена и формиата свинца.

ЛИТЕРАТУРА

1. Saleh, T.A. Nanomaterials: Classification, properties, and environmental toxicities / T.A. Saleh // *Environmental Technology & Innovation*. – 2020. – Vol. 20. – Article 101067.
2. Витязь, П.А. Наноматериаловедение: учеб. пособие для студентов вузов / П.А. Витязь, Н.А. Свидунович, Д.В. Куис. – Минск: Вышэйшая школа, 2015. – 511 с.
3. Sheta, S.M. Nanomaterials and metal-organic frameworks for biosensing applications of mutations of the emerging viruses / S.M. Sheta, S.M. El-Sheikh // *Analytical Biochemistry*. – 2022. – Vol. 648. – 114680.
4. *Molecular structure, optical, electrical and sensing properties of PANI-based coatings with silver nanoparticles deposited from the active gas*

phase / A.A. Rogachev [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2015. – Vol. 351. – P. 811–818.

5. *Features of the formation of nanoparticles based on copper in thin-layer systems* / A.V. Rogachev [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2014. – Vol. 317. – P. 449–456.

6. *Recently Emerging Nanotechnological Advancements in Polymer Nanocomposite Coatings for Anti-corrosion, Anti-fouling and Self-healing* / C.I. Idumah, C.M. Obele, E.O. Emmanuel, A. Hassan // *Surfaces and Interfaces*. – 2020. – Vol. 21. – Article 100734.

7. *Recent trends in functionalized nanoparticles loaded polymeric composites: An energy application* / T.A. Saleh [et al.] // *Materials Science for Energy Technologies*. – 2020. – Vol. 3. – P. 515–525.

8. *Fabrication of graphene oxide / multi-walled carbon nanotube / urushiol formaldehyde polymer composite coatings and evaluation of their physico-mechanical properties and corrosion resistance* / L. Zhang [et al.] // *Progress in Organic Coatings*. – 2019. – Vol. 127. – P. 131–139.

9. *Carbon fiber / epoxy composites: effect of zinc sulphide coated carbon nanotube on thermal and mechanical properties* / G.K. Maron [et al.] // *Polymer Bulletin*. – 2018. – Vol. 75. – P. 1619–1633.

10. *Althues, H. Functional inorganic nanofillers for transparent polymers* / H. Althues, J. Henle, S. Kaskel // *Chemical Society Reviews*. – 2007. – Vol. 36. – P. 1454–1465.

11. *Ciprari, D. Characterization of polymer nanocomposite interphase and its impact on mechanical properties* / D. Ciprari, K. Jacob, R. Tanenbaum // *Macromolecules*. – 2006. – Vol. 39. – P. 6565–6573.

12. *Magnesium containing coatings formed by a low-energy electron beam* / Jintao Xiao [et al.] // *Surface and Coatings Technology*. – 2018. – Vol. 349. – P. 61–70.

13. Беллами, А. Инфракрасные спектры сложных молекул / А. Беллами. – Москва: Мир, 1963. – 592 с.

14. Кинетические закономерности термических превращений в наноразмерных пленках свинца / Э.П. Суевой, С.В. Бин, Л.Н. Бугерко, В.Э. Суевая // Журнал физической химии. – 2015. – Т. 89, № 1. – С. 85–91.

15. *Structure and properties of microcellulose-based coatings deposited via a low-energy electron beam and their effect on the properties of wound dressings* / Y. Liu [et al.] // Carbohydrate Polymer Technologies and Applications. – 2021. – Vol. 2. – Article 100146.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь в рамках НИР «Разработка основ комбинированной технологии формирования планарно-структурированных углеродных покрытий из

импульсной катодной углеродной плазмы и продуктов лазерного диспергирования полимерных материалов», комплексное 1.12 задание «Синтез нанокмпозиционных пленочных структур, формирование материалов с высокими функциональными свойствами с использованием электронно-лучевых, ионных, лазерных методов обработки» ГПНИ «Фотоника и электроника для инновации», подпрограмма «Фотоника и ее применения».

Поступила в редакцию 24.06.2022.

Информация об авторах

Руденков Александр Сергеевич – к.т.н., доцент
Ярмоленко Максим Анатольевич – д.т.н., доцент

АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ, ГЕНЕРИРУЕМОГО В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦАХ БОЛЬШОЙ ВЫСОТЫ

А.И. Толкачёв, А.А. Шамына, В.Н. Капшай

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

ANALYSIS OF ENERGY CHARACTERISTICS OF THE SECOND-HARMONIC GENERATION IN LONG CYLINDRICAL DIELECTRIC PARTICLES

A.I. Talkachov, A.A. Shamyna, V.N. Kapshai

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Определены явный вид плотности мощности, полной мощности генерируемого излучения второй гармоники и условия их максимума в тонком цилиндрическом слое большой высоты и малого радиуса. Исследовано пространственное распределение генерируемого излучения для различных случаев тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости. Произведена численная максимизация интенсивности второй гармоники для диапазона радиусов оснований частицы от нанометров до микрометров. Найдено распределение излучения, генерируемого от линейной структуры из цилиндрических частиц. Установлены условия, при которых генерация излучения максимальна и условия, при которых генерация не происходит.

Ключевые слова: генерация второй гармоники, диэлектрическая цилиндрическая частица, тензор нелинейной диэлектрической восприимчивости второго порядка, оптимизация, мощность излучения, диаграмма направленности, линейная структура.

Для цитирования: Толкачёв, А.И. Анализ энергетических характеристик излучения второй гармоники, генерируемого в диэлектрических цилиндрических частицах большой высоты / А.И. Толкачёв, А.А. Шамына, В.Н. Капшай // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 53–63. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_53. – EDN: PMWHFF

Abstract. The explicit forms of the power density, the total radiation power of the second-harmonic generation in a long thin cylindrical layer of a small radius, and the conditions for their maximum are found. The spatial distribution of the generated radiation is examined for special cases of the nonlinear dielectric susceptibility tensor. A numerical maximization of the intensity of the second-harmonic is carried out for the range of the particle base radius from nanometers to micrometers. The distribution of the generated radiation from a linear structure of cylindrical particles is determined. The conditions at which the generated radiation is maximal and the conditions at which there occurs no generation are found.

Keywords: second harmonic generation, cylindrical dielectric particle, second-order nonlinear dielectric susceptibility tensor, optimization, radiation power, directivity pattern, linear structure.

For citation: Talkachov, A.I. Analysis of energy characteristics of the second-harmonic generation in long cylindrical dielectric particles / A.I. Talkachov, A.A. Shamyna, V.N. Kapshai // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 53–63. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_53 (in Russian). – EDN: PMWHFF

Введение

Нелинейные оптические эффекты, такие как генерация второй гармоники и генерация суммарной частоты, являются избирательными методами исследования поверхностей центросимметричных микро- и наночастиц [1], [2], [3]. Они позволяют определять поверхностную концентрацию молекул [4], их ориентацию, поверхностную плотность заряда поверхности [5]. Существует точная теория Ми, основанная на непосредственном решении уравнений Максвелла, которая позволяет найти генерируемые поля от сферической и бесконечной цилиндрической частиц [6], [7]. Ее недостатком является, то, что

решение записывается в виде бесконечного ряда, поэтому его анализ затруднен. Использование приближенных моделей, основанных на приближениях Рэлея – Ганса – Дебая [2], [8], [9] и Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна [2], [9], [10], позволяет найти аналитические выражения для напряженности генерируемого поля, которые справедливы для оптически «мягких» частиц.

Данная работа посвящена исследованию пространственного распределения генерируемого излучения второй гармоники от длинных цилиндров. В области малых значений радиусов анализ проводится аналитически, для больших радиусов – численными методами. Во втором разделе

рассматривается нелинейная генерация от линейной структуры из параллельных цилиндров, аналитически находятся оптимальные сочетания параметров для достижения максимальной интенсивности второй гармоники.

1 Генерация второй гармоники от боковой поверхности длинного цилиндра

1.1 Постановка и решение задачи

Пусть цилиндрическая частица радиусом основания a и высотой h ($a \ll h$) покрыта слоем оптически нелинейного вещества толщины d_0 ($d_0 \ll a$). Расположим её так, чтобы ось цилиндра совпадала с осью Oz декартовой и цилиндрической систем координат, а геометрический центр находился в начале координат (рисунок 1.1, а).

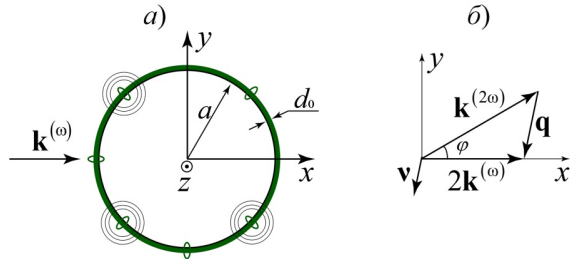


Рисунок 1.1 – (а) Схема задачи о ГВГ от поверхности цилиндрической частицы большой высоты, (б) схема используемых векторов

Рассмотрим нормальное к оси симметрии падение на боковую поверхность цилиндрической частицы плоской электромагнитной волны, вектор напряженности электрического поля которой определим следующим образом:

$$\mathbf{E}^{(\omega)}(\mathbf{x}, t) = E_0 \mathbf{e}^{(\omega)} \exp(i\mathbf{k}^{(\omega)} \mathbf{x} - i\omega t). \quad (1.1)$$

Здесь E_0 – ее комплексная амплитуда, $\mathbf{e}^{(\omega)}$ – единичный комплексный вектор поляризации, $\mathbf{k}^{(\omega)}$ – волновой вектор (рисунок 1.1, а).

ГВГ обусловлена нелинейным слагаемым вектора поляризации среды

$$P_i^{(2)} = \chi_{ijk}^{(2)} E_j^{(\omega)} E_k^{(\omega)}, \quad (1.2)$$

где $\chi_{ijk}^{(2)}$ – тензор нелинейной диэлектрической восприимчивости нелинейного вещества, который можно представить в виде

$$\chi_{ijk}^{(2)} = \chi_1^{(2)} n_i n_j n_k + \chi_2^{(2)} n_i \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} (n_j \delta_{ik} + n_k \delta_{ij}) + \chi_4^{(2)} n_m (n_k \varepsilon_{ijm} + n_j \varepsilon_{ikm}). \quad (1.3)$$

Здесь n_i – компоненты вектора нормали \mathbf{n} к поверхности, δ_{ij} – дельта-символ Кронекера, ε_{ijk} – символ Леви – Чивита. В дальнейшем под типом анизотропии $\chi_i^{(2)}$ подразумеваются значения независимых компонент тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$

$$\chi_i^{(2)} = 1, \chi_j^{(2)} \Big|_{j \neq i} = 0.$$

В пределе большой высоты цилиндрической частицы по сравнению с ее радиусом генерацией от торцов можно пренебречь, также в работе [8] было показано, что для используемой нами схемы задачи (рисунок 1.1, а) излучение генерируется преимущественно в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра. В связи с этим выражение для вектора напряженности электрического поля удвоенной частоты в дальней зоне удобно представлять в цилиндрических координатах:

$$\mathbf{E}^{(2\omega)}(\mathbf{x}) = 2\pi \mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} d_0 a h E_0^2 \times \times (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)} \frac{\exp(ik_{2\omega} \rho)}{\rho}, \quad (1.4)$$

где $k_{2\omega} = |\mathbf{k}^{(2\omega)}|$ – модуль волнового вектора генерируемой волны, $\mathbf{f}^{(2\omega)}$ – вектор, характеризующий пространственное распределение генерируемого излучения. Он имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^{(2\omega)} = & i\chi_1^{(2)} \left\{ -J_3(qa) \mathbf{v}(\mathbf{ve}^{(\omega)})^2 + \right. \\ & + \frac{1}{4} (J_1(qa) + J_3(qa)) \left[\mathbf{v} \left((\mathbf{e}^{(\omega)} \mathbf{e}^{(\omega)}) - (\mathbf{e}^{(\omega)} \mathbf{e}_z)^2 \right) + \right. \\ & \left. \left. + 2(\mathbf{ve}^{(\omega)}) (\mathbf{e}^{(\omega)} - \mathbf{e}_z (\mathbf{e}^{(\omega)} \mathbf{e}_z)) \right] \right\} + \\ & + iJ_1(qa) \left(\chi_2^{(2)} \mathbf{v}(\mathbf{e}^{(\omega)} \mathbf{e}^{(\omega)}) + 2\chi_3^{(2)} \mathbf{e}^{(\omega)} (\mathbf{ve}^{(\omega)}) \right) - \\ & - \chi_4^{(2)} (J_0(qa) + J_2(qa)) \left[\mathbf{e}^{(\omega)} \times \mathbf{e}_z \right] (\mathbf{e}^{(\omega)} \mathbf{e}_z) - \\ & - 2\chi_4^{(2)} J_2(qa) \left[\mathbf{e}^{(\omega)} \times \mathbf{v} \right] (\mathbf{ve}^{(\omega)}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Здесь $\mathbf{q} = 2\mathbf{k}^{(\omega)} - \mathbf{k}^{(2\omega)}$ – вектор рассеяния (он находится в плоскости Oxy , рисунок 1.1, б), $q = |\mathbf{q}|$, \mathbf{v} – единичный вектор вдоль \mathbf{q} (рисунок 1.1, б), $J_m(qa)$ – цилиндрические функции Бесселя.

Экспериментально измеряемыми величинами являются плотность генерируемой мощности

$$S^{(2\omega)}(\mathbf{x}) = \frac{c}{8\pi \mu_{2\omega}} |\mathbf{E}^{(2\omega)}|^2 = S_0 \cdot \left| (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) \right|^2, \quad (1.6)$$

и полная генерируемая мощность

$$\begin{aligned} W^{(2\omega)} = & \int_{-\pi}^{\pi} S^{(2\omega)}(\mathbf{x}) \cdot \rho h d\varphi = \\ = & S_0 \rho h \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \left| (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) \right|^2 d\varphi, \end{aligned} \quad (1.7)$$

где введена вспомогательная величина

$$S_0 = 8\pi c \frac{\mu_{2\omega} n_{2\omega}}{n_\omega^4} \frac{d_0^2}{\rho^2} (k_\omega a)^2 (k_\omega h)^2 E_0^4, \quad k_\omega = |\mathbf{k}^{(\omega)}|.$$

1.2 Явный вид векторов

Не нарушая общности, будем считать, что волновой вектор исходной электромагнитной волны направлен вдоль оси Ox (рисунок 1.1, а). Схема векторов в задаче представлена на рисунке 1.1, б. Волновые векторы исходной и гене-

рируемой волн, комплексный вектор поляризации исходной волны в декартовой системе координат имеют аналогично [11] вид

$$\begin{aligned} \mathbf{k}^{(0)} &= k_0 \mathbf{e}_x, \\ \mathbf{k}^{(2\omega)} &= 2k_0 \xi (\cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \varphi \mathbf{e}_y), \\ \mathbf{e}^{(0)} &= \frac{\sin \varphi_{in} - i\sigma \cos \varphi_{in}}{\sqrt{1+\sigma^2}} \mathbf{e}_y + \\ &+ \frac{\cos \varphi_{in} + i\sigma \sin \varphi_{in}}{\sqrt{1+\sigma^2}} \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (1.8)$$

где ξ – показатель дисперсии, определяемый соотношением

$$\xi = \frac{|\mathbf{k}^{(2\omega)}|}{2k_0} = \frac{n_{2\omega}}{n_0}, \quad (1.9)$$

φ_{in} – азимут поляризации исходной волны (угол между большой полуосью эллипса поляризации и осью Oz), σ – величина, характеризующая эллиптичность падающей волны. Полярный угол наблюдения φ может принимать любые значения в области $(-\pi; \pi]$.

Вектор рассеяния \mathbf{q} и его модуль q соответственно равны

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= -2k_0 ((\xi \cos \varphi - 1) \mathbf{e}_x + \xi \sin \varphi \mathbf{e}_y), \\ q &= 2k_0 \sqrt{1 - 2\xi \cos \varphi + \xi^2}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Используя приведенные выше выражения для векторов, можно определить явный вид интенсивности и полной генерируемой мощности излучения удвоенной частоты. Так, ранее в работе [12] было показано, что генерация второй гармоники не происходит в направлениях $\varphi = 0, \pi$ для рассматриваемой здесь схемы задачи, при произвольных параметрах задачи и типах тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$. Далее в этом разделе указанные глобальные минимумы интенсивности обсуждаться не будут.

1.3 Анализ энергетических характеристик для малого радиуса основания частицы

Точное выражение для генерируемой плотности мощности второй гармоники (1.6) содержит цилиндрические функции Бесселя, ввиду чего анализ данного выражения затруднен. В пределе малого аргумента функции Бесселя можно разложить в ряд:

$$J_m(z) \approx \frac{z^m}{2^m m!} - \frac{z^{m+2}}{2^{m+2} (m+1)!}. \quad (1.11)$$

Так, для цилиндрической частицы малого радиуса основания по сравнению с длиной волны падающего излучения данное приближенное выражение может быть использовано во всем возможном диапазоне полярного угла φ . Диапазон применимости приближенных формул с отклонением результата не более 5% от точного указан в таблице 1.1. Используя приведенные данные, можно наложить ограничение на параметры задачи в виде

$$2k_0(1+\xi)a \leq z_{\max}, \quad (1.12)$$

где z_{\max} – верхняя граница области применимости приближенных выражений из таблицы 1.1. Таблица 1.1 – Области применимости приближенных выражений для цилиндрических функций Бесселя

Функция Бесселя	Приближение	Область применимости
$J_0(z)$	1	$0 \leq z \leq 0,439$
	$1 - z^2/4$	$0 \leq z \leq 1,219$
$J_1(z)$	$z/2$	$0 \leq z \leq 0,622$
	$z/2 - z^3/16$	$0 \leq z \leq 1,633$
$J_2(z)$	$z^2/8$	$0 \leq z \leq 0,763$
$J_3(z)$	$z^3/48$	$0 \leq z \leq 0,881$

Далее мы будем рассматривать частные случаи тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$, соответствующие отдельным типам анизотропии, с целью нахождения явного вида интенсивности и полной мощности генерируемого излучения и аналитического поиска максимума данных выражений.

1.3.1 Приближенное решение для типа анизотропии $\chi_1^{(2)}$

Для типа анизотропии $\chi_1^{(2)}$ используем разложение функций Бесселя в формуле (1.5), пренебрегая слагаемыми выше первого порядка по qa . Для этого воспользуемся первым типом разложения цилиндрической функции Бесселя первого порядка из таблицы 1.1, что справедливо в области $2k_0 a(1+\xi) \leq 0,622$. Тогда плотность генерируемой мощности (1.6) можно представить в виде

$$\begin{aligned} S^{(2\omega)} &= S_0 \cdot \left(\frac{1}{4} k_0 a \chi_1^{(2)} \right)^2 \left(\frac{\sin^2 \varphi_{in} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{in}}{1 + \sigma^2} \right)^2 \times \\ &\times (1 + 2\xi \cos \varphi)^2 \sin^2 \varphi. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Здесь вспомогательная величина S_0 не содержит полярного угла φ , σ и φ_{in} . Приравняв производную интенсивности (1.13) по углу φ к нулю, найдем оптимальный угол наблюдения и максимальную по направлению наблюдения плотность мощности:

$$\begin{aligned} \varphi_{\max} &= \pm \arccos \left(\frac{\sqrt{1 + 32\xi^2} - 1}{8\xi} \right), \\ S_{\max}^{(2\omega)} &= S_0 \cdot \left(\frac{1}{4} k_0 a \chi_1^{(2)} \right)^2 \left(\frac{\sin^2 \varphi_{in} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{in}}{1 + \sigma^2} \right)^2 \times \\ &\times \frac{(\sqrt{1 + 32\xi^2} + 3)^3 (\sqrt{1 + 32\xi^2} - 1)}{1024\xi^2}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

В области $\xi \geq 0,5$ выражение (1.13) имеет также локальный максимум, соответствующий углам

$$\varphi = \pm \arccos \left(-\frac{\sqrt{1 + 32\xi^2} + 1}{8\xi} \right),$$

и глобальный минимум ($S^{(2\omega)} = 0$) в направлениях $\varphi = \pm \arccos(-1/2\xi)$.

Теперь можно определить максимальную плотность генерируемой мощности при возможности варьирования параметров σ и φ_{in} , связанных с исходным излучением. Максимум достигается при использовании линейно поляризованной волны ($\sigma_{max} = 0$) с плоскостью поляризации перпендикулярно оси цилиндра ($\varphi_{in max} = \pi / 2$) и равен

$$S_{max}^{(2\omega)} = S_0 \cdot \left(\frac{1}{128\xi} k_{\omega} a \chi_1^{(2)} \right)^2 \times \left(\sqrt{1+32\xi^2} + 3 \right)^3 \left(\sqrt{1+32\xi^2} - 1 \right). \quad (1.15)$$

Используя определение (1.7) можно определить полную генерируемую мощность:

$$W^{(2\omega)} = S_0 \rho h \cdot \left(\frac{1}{4} k_{\omega} a \chi_1^{(2)} \right)^2 \times \left(\frac{\sin^2 \varphi_{in} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{in}}{1 + \sigma^2} \right)^2 \pi (1 + \xi^2). \quad (1.16)$$

Данное выражение максимально при условиях аналогичных максимуму интенсивности ($\sigma_{max} = 0$, $\varphi_{in max} = \pi / 2$). Вспомогательная величина $S_0 \propto \rho^2$, поэтому полная генерируемая мощность зависит от расстояния до цилиндрической частицы как $W^{(2\omega)} \propto \rho^{-1}$.

1.3.2 Приближенное решение для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$

Разложение плотности генерируемой мощности до первого порядка по qa для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$ приводит к результату

$$S^{(2\omega)} = S_0 \cdot \left(k_{\omega} a \chi_2^{(2)} \right)^2 \left(\frac{1 - \sigma^2}{1 + \sigma^2} \right)^2 \sin^2 \varphi, \quad (1.17)$$

который справедлив для параметров задачи, удовлетворяющих условию $2k_{\omega} a (1 + \xi) \leq 0,622$. Отметим, что интенсивность не зависит от азимута поляризации исходной волны. Очевидно, что максимум (1.17) достигается при $\varphi_{max} = \pm \pi / 2$ и использовании линейно поляризованного излучения и равен

$$S_{max}^{(2\omega)} = S_0 \cdot \left(k_{\omega} a \chi_2^{(2)} \right)^2. \quad (1.18)$$

Полная генерируемая мощность может быть представлена в виде

$$W^{(2\omega)} = S_0 \rho h \cdot \left(k_{\omega} a \chi_2^{(2)} \right)^2 \left(\frac{1 - \sigma^2}{1 + \sigma^2} \right)^2 \pi. \quad (1.19)$$

Она также не зависит от азимута поляризации исходной волны и максимальна при $\sigma_{max} = 0$.

Для данного типа анизотропии генерация второй гармоники не происходит при использовании циркулярно поляризованного излучения ($\sigma = \pm 1$) [12], что можно видеть из выражений (1.17) и (1.19).

В данном случае тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ можно продолжить разложение плотности мощности (1.6) до третьего порядка по qa с возможностью аналитического нахождения максимума. В данном случае область применимости расширяется до $2k_{\omega} a (1 + \xi) \leq 1,633$, но распределение генерируемого излучения теперь зависит от радиуса частицы:

$$S^{(2\omega)} = S_0 \cdot \left(\frac{1}{2} k_{\omega} a \chi_2^{(2)} \right)^2 \left(\frac{1 - \sigma^2}{1 + \sigma^2} \right)^2 \times \left(2 - (k_{\omega} a)^2 (1 + \xi^2) + 2(k_{\omega} a)^2 \xi \cos \varphi \right)^2 \sin^2 \varphi. \quad (1.20)$$

Для удобства можно считать, что в области $k_{\omega} a (1 + \xi) \leq 0,311$ с отклонением не более 5% справедливо выражение для плотности мощности (1.17), а в области $0,622 \leq 2k_{\omega} a (1 + \xi) \leq 1,633$ необходимо пользоваться приближенным соотношением (1.20).

Выражение для интенсивности (1.20) достигает максимума при

$$\varphi_{max} = \pm \arccos \left(\left(\sqrt{32(k_{\omega} a)^4 \xi^2 + (2 - (k_{\omega} a)^2 - (k_{\omega} a)^2 \xi^2)^2} - 2 + (k_{\omega} a)^2 + (k_{\omega} a)^2 \xi^2 \right) / (8(k_{\omega} a)^2 \xi) \right), \quad (1.21)$$

которое в пределе $k_{\omega} a \rightarrow 0$ приводит к результату $\varphi_{max} = \pm \pi / 2$, полученному ранее. Явный вид максимальной плотности мощности довольно громоздкий, поэтому здесь мы его не приводим. Как и ранее, наибольшая генерация происходит при использовании линейно поляризованного излучения, что справедливо и для полной генерируемой мощности, которая имеет вид

$$W^{(2\omega)} = S_0 \rho h \cdot \left(k_{\omega} a \chi_2^{(2)} \right)^2 \left(\frac{1 - \sigma^2}{1 + \sigma^2} \right)^2 \pi \times \left(1 - (k_{\omega} a)^2 (1 + \xi^2) + \frac{1}{4} (k_{\omega} a)^4 (1 + 3\xi^2 + \xi^4) \right). \quad (1.22)$$

1.3.3 Приближенное решение для типа анизотропии $\chi_3^{(2)}$

Интенсивность генерируемого излучения второй гармоники в области $2k_{\omega} a (1 + \xi) \leq 0,622$ приближенно описывается выражением

$$S^{(2\omega)} = 2S_0 \cdot \left(k_{\omega} a \chi_3^{(2)} \right)^2 \frac{\sin^2 \varphi_{in} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{in}}{(1 + \sigma^2)^2} \times \sin^2 \varphi \left(2 + 2\sigma^2 \cos^2 \varphi \cos^2 \varphi_{in} - (1 - 2\sigma^2 - \cos 2\varphi) \sin^2 \varphi_{in} \right). \quad (1.23)$$

Максимум данного выражения по направлению наблюдения φ регистрируется при

$$\varphi_{max} = \pm \frac{\pi}{2}, \text{ если } \varphi_{in} \in [0; \pi / 4];$$

$$\varphi_{max} = \pm \arccos \left(\pm \sqrt{\frac{-(1 - \sigma^2) \cos 2\varphi_{in}}{1 + \sigma^2 - (1 - \sigma^2) \cos 2\varphi_{in}}} \right), \quad (1.24)$$

если $\varphi_{in} \in (\pi / 4; \pi / 2]$

и равен

$$S_{\max}^{(2\omega)} = 2S_0 \cdot (k_{\omega} a \xi \chi_3^{(2)})^2 \frac{\sin^2 \varphi_{\text{in}} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{\text{in}}}{(1 + \sigma^2)^2} \times \begin{cases} 2 - 2(1 - \sigma^2) \sin^2 \varphi_{\text{in}}, & \varphi_{\text{in}} \in \left[0; \frac{\pi}{4}\right] \\ \frac{(1 + \sigma^2)^2}{2(\sin^2 \varphi_{\text{in}} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{\text{in}})}, & \varphi_{\text{in}} \in \left[\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{2}\right]. \end{cases} \quad (1.25)$$

Найдем максимум плотности генерируемой мощности при возможности варьирования параметров σ и φ_{in} :

$$S_{\max}^{(2\omega)} = S_0 \cdot (k_{\omega} a \xi \chi_3^{(2)})^2. \quad (1.26)$$

Данное значение достигается в областях $\forall \sigma$, $\varphi_{\text{in}} \in [\pi/4; \pi/2]$ и $\sigma = \pm 1$, $\forall \varphi_{\text{in}}$.

Полная генерируемая мощность задается выражением

$$W^{(2\omega)} = 2S_0 \rho h \cdot (k_{\omega} a \xi \chi_3^{(2)})^2 \times \frac{\sin^2 \varphi_{\text{in}} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{\text{in}}}{(1 + \sigma^2)^2} \pi \times (1 + 4\sigma^2 + 3(1 - \sigma^2) \cos^2 \varphi_{\text{in}}). \quad (1.27)$$

Она достигает максимума

$$W_{\max}^{(2\omega)} = S_0 \rho h \cdot (k_{\omega} a \xi \chi_3^{(2)})^2 \frac{8}{3} \pi \quad (1.28)$$

при $|\sigma_{\max}| \in \left[0; \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$, $\varphi_{\text{in max}} = \arccos\left(\pm \frac{1 - 2\sigma^2}{3(1 - \sigma^2)}\right)$.

1.3.4 Приближенное решение для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$

Для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ выражение для плотности мощности (1.6) содержит цилиндрическую функцию Бесселя нулевого порядка, поэтому в качестве первого приближения можно записать

$$S^{(2\omega)} = S_0 \cdot (\chi_4^{(2)})^2 \frac{4\sigma^2 + (1 - \sigma^2)^2 \sin^2 2\varphi_{\text{in}}}{4(1 + \sigma^2)^2} \sin^2 \varphi, \quad (1.29)$$

что справедливо для $2k_{\omega} a(1 + \xi) \leq 0,439$. Максимальная по направлению наблюдения плотность мощности достигается при $\varphi_{\max} = \pm \pi/2$ и равна

$$S_{\max}^{(2\omega)} = S_0 \cdot (\chi_4^{(2)})^2 \frac{4\sigma^2 + (1 - \sigma^2)^2 \sin^2 2\varphi_{\text{in}}}{4(1 + \sigma^2)^2}. \quad (1.30)$$

При возможности варьирования параметров σ и φ_{in} максимальная интенсивность оказывается равной

$$S_{\max}^{(2\omega)} = S_0 \cdot \left(\frac{1}{2} \chi_4^{(2)}\right)^2 \quad (1.31)$$

при $\forall \sigma_{\max}$, $\varphi_{\text{in max}} = \pi/4$ и $\sigma_{\max} = \pm 1$, $\forall \varphi_{\text{in max}}$.

Полная генерируемая мощность имеет вид

$$W^{(2\omega)} = S_0 \rho h \cdot (\chi_4^{(2)})^2 \frac{4\sigma^2 + (1 - \sigma^2)^2 \sin^2 2\varphi_{\text{in}}}{4(1 + \sigma^2)^2} \pi. \quad (1.32)$$

Она достигает максимальных значений для параметров, указанных выше для оптимальной плотности мощности.

Из формул (1.29) и (1.32) можно видеть, что для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ генерация второй гармоники не происходит при $\sigma = 0$, $\varphi_{\text{in}} = \pi/2$, однако этот вывод справедлив в рамках первого приближения. Если учесть следующий ненулевой порядок в разложении по qa , то интенсивность в области $2k_{\omega} a(1 + \xi) \leq 0,763$ определяется как

$$S^{(2\omega)} = S_0 \cdot (\chi_4^{(2)})^2 \frac{\sin^2 \varphi}{4(1 + \sigma^2)^2} \times \left(4(k_{\omega} a)^4 \xi^2 (1 - \xi \cos \varphi)^2 (\sin^2 \varphi_{\text{in}} + \sigma^2 \cos^2 \varphi_{\text{in}})^2 + (2 - (k_{\omega} a)^2 (1 + 3\xi^2 - 4\xi \cos \varphi))^2 \times \left(\sigma^2 + \frac{1}{4}(1 - \sigma^2)^2 \sin^2 2\varphi_{\text{in}}\right)\right). \quad (1.33)$$

Аналитический поиск максимума данного выражения затруднен, однако численный анализ показывает, что значения оптимальных параметров изменяются незначительно от найденных ранее в рамках первого приближения.

Выражение (1.33) записано с целью того, чтобы показать, что при падении линейно поляризованной волны с плоскостью поляризации перпендикулярно оси цилиндрической частицы генерация второй гармоники происходит. Вблизи точки $\sigma = 0$, $\varphi_{\text{in}} = \pi/2$ второе слагаемое в скобках стремится к нулю, а первое слагаемое, содержащее множитель $(k_{\omega} a)^4$, отлично от нуля. Оно и будет отвечать за генерацию в данном случае. Однако для остальных значений параметров σ и φ_{in} , где наблюдается на порядки большая интенсивность, им можно пренебречь по сравнению со вторым слагаемым ввиду четвертой степени $k_{\omega} a$:

$$S^{(2\omega)} = S_0 \cdot (\chi_4^{(2)})^2 \frac{4\sigma^2 + (1 - \sigma^2)^2 \sin^2 2\varphi_{\text{in}}}{16(1 + \sigma^2)^2} \times \left(2 - (k_{\omega} a)^2 (1 + 3\xi^2 - 4\xi \cos \varphi)\right)^2 \sin^2 \varphi. \quad (1.34)$$

Максимум данного выражения по углу наблюдения φ наблюдается для

$$\varphi_{\max} = \pm \arccos\left(\frac{(k_{\omega} a)^2 (1 + 3\xi^2) - 2}{16(k_{\omega} a)^2 \xi} + \frac{\sqrt{128(k_{\omega} a)^4 \xi^2 + (2 - (k_{\omega} a)^2 (1 + 3\xi^2))^2}}{16(k_{\omega} a)^2 \xi}\right). \quad (1.35)$$

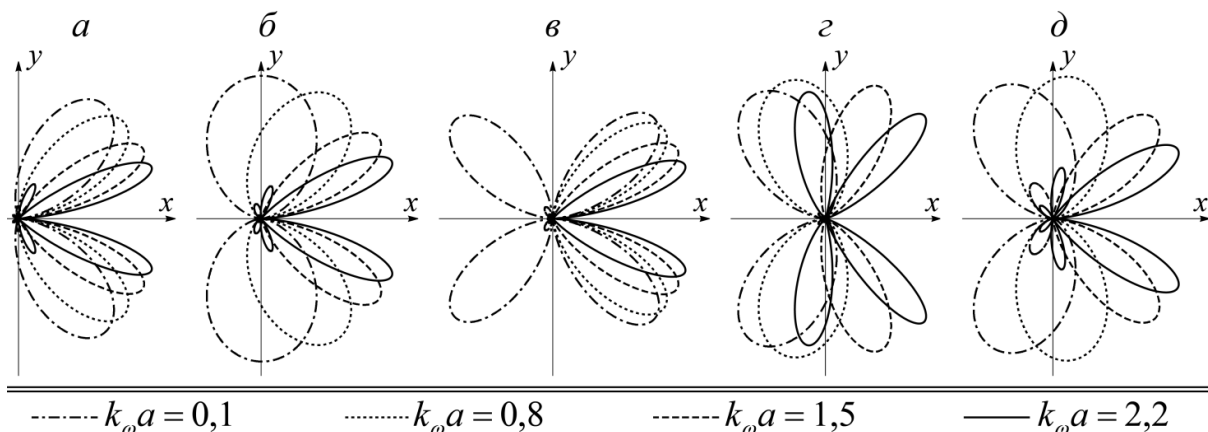


Рисунок 1.2 – Диаграммы направленности для следующих случаев тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$:

(а) тип анизотропии $\chi_1^{(2)}$, (б) тип анизотропии $\chi_2^{(2)}$, (в) тип анизотропии $\chi_3^{(2)}$,

(г) тип анизотропии $\chi_4^{(2)}$, (д) малахитовый зеленый

В пределе $k_\omega a \rightarrow 0$ оптимальный угол наблюдения $\varphi_{\max} = \pm\pi / 2$, что согласуется с результатами первого приближения.

1.4 Анализ диаграмм направленности генерируемого излучения

В данном подразделе мы исследуем влияние радиуса основания частицы на форму диаграмм направленности генерируемого излучения. Диаграмма направленности – график, характеризующий пространственное распределение плотности генерируемой мощности. В данном случае генерация происходит в плоскости Oxy , поэтому диаграммы направленности будут представлены в полярных координатах, где начало координат соответствует положению оси цилиндрической частицы. На рисунке 1.2 представлены нормированные диаграммы направленности генерируемого излучения для четырех радиусов оснований цилиндрической частицы и пяти случаев тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$, соответствующих типам анизотропии $\chi_{1-4}^{(2)}$ и малахитовому зеленому (МЗ): $\chi_1^{(2)} = -0,627$, $\chi_2^{(2)} = 0,778$, $\chi_3^{(2)} = -0,021$, $\chi_4^{(2)} = 0$ [7], [13]. Построения проведены при использовании линейно поляризованного излучения ($\sigma = 0$) с плоскостью поляризации перпендикулярной оси цилиндра ($\varphi_{in} = \pi / 2$) и показателя дисперсии $\xi = 1,34/1,33$, соответствующего воде на длинах волн 400 и 800 нм в вакууме [14].

Для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}, \chi_2^{(2)}, \chi_4^{(2)}$ и малахитового зеленого в диапазоне $k_\omega a \in [0,01; 1]$ происходит трансформация формы диаграммы направленности без изменения количества лепестков. Для типа анизотропии $\chi_3^{(2)}$ увеличение радиуса основания в указанном выше диапазоне приводит к изменению формы распределения генерируемого излучения и уменьшению количества лепестков с 4 до 2. Для всех рассмотренных

типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ увеличение радиуса основания в области $k_\omega a > 1$ приводит к возрастанию количества лепестков диаграммы направленности, а также их сужению. Так, для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}, \chi_2^{(2)}, \chi_3^{(2)}$ и малахитового зеленого в области больших радиусов оснований можно выделить два главных лепестка вблизи положительного направления оси Ox , в направлении которых генерируется наибольшая плотность мощности, и множество побочных лепестков, в направлении которых генерируется гораздо меньшая интенсивность. Для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ в области больших значений параметра $k_\omega a$ наблюдается большое количество лепестков сравнимых размеров, т. е. интенсивность генерируемого излучения в данных направлениях имеет одинаковый порядок.

1.5 Численная оптимизация плотности генерируемой мощности

В данном подразделе рассмотрим результаты численной максимизации плотности мощности второй гармоники по параметрам φ , σ и φ_{in} для различных радиусов цилиндрической частицы большой высоты. Фиксированными параметрами являются высота частицы h и показатель дисперсии ($\xi = 1,34 / 1,33$).

В общем случае увеличение радиуса основания цилиндрической частицы приводит к возрастанию максимальной по направлению φ плотности мощности. Введем вспомогательную плотность мощности

$$s^{(2\omega)} = \frac{S^{(2\omega)}}{S_0} = \left| (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) \right|^2. \quad (1.36)$$

Она характеризует интенсивность и распределение генерируемого излучения. Напомним, что вспомогательная величина $S_0 \propto (k_\omega a)^2$, поэтому если вспомогательная плотность мощности

возрастает при увеличении радиуса основания цилиндрической частицы, то плотность мощности $S^{(2\omega)}$ возрастает быстрее, чем $(k_\omega a)^2$, и наоборот. Если вспомогательная плотность мощности остается постоянной, то плотность мощности $S^{(2\omega)} \propto (k_\omega a)^2$.

Проведем численную максимизацию вспомогательной плотности мощности по параметрам φ , σ и φ_{in} для различных фиксированных радиусов оснований в диапазоне $0,01 \leq k_\omega a \leq 20$, что соответствует радиусам оснований от нескольких нанометров до нескольких микрометров для выбранных ранее фиксированных параметров среды и исходного излучения. Варьируемые параметры φ , σ и φ_{in} лежат в следующих пределах:

$$-\pi < \varphi \leq \pi, \quad -1 \leq \sigma \leq 1, \quad 0 \leq \varphi_{in} \leq \pi. \quad (1.37)$$

Также ввиду свойств замены

$$\begin{aligned} S^{(2\omega)}(-\varphi, \sigma, \varphi_{in}) &= S^{(2\omega)}(\varphi, \sigma, \varphi_{in}), \\ S^{(2\omega)}(\varphi, -\sigma, \varphi_{in}) &= S^{(2\omega)}(\varphi, \sigma, \varphi_{in}), \\ S^{(2\omega)}(\varphi, \sigma, \pi - \varphi_{in}) &= S^{(2\omega)}(\varphi, \sigma, \varphi_{in}), \end{aligned} \quad (1.38)$$

которые справедливы и для вспомогательной плотности мощности, результаты оптимизации могут быть множественными. Далее будут представлены результаты только для неотрицательных значений параметров φ , σ и значений $0 \leq \varphi_{in} \leq \pi/2$ с точностью до трех знаков после десятичного знака. Отметим, что второе свойство замены (1.38) справедливо лишь для типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ с компонентами $\chi_{1-3}^{(2)} \neq 0$, $\chi_4^{(2)} = 0$ и $\chi_{1-3}^{(2)} = 0$, $\chi_4^{(2)} \neq 0$. Максимизацию будем проводить для типов анизотропии $\chi_{1-4}^{(2)}$, введенных ранее, и малахитового зеленого.

Общим свойством для всех рассмотренных типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ является то, что максимум плотности мощности достигается при использовании линейно поляризованного излучения. Для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}$ и $\chi_3^{(2)}$ плоскость поляризации должна быть перпендикулярна оси цилиндра ($\varphi_{in \max} = \pi/2$), для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$ – может быть произвольной ($\forall \varphi_{in \max}$ в пределах, указанных в (1.37)). Для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ в области малых радиусов оснований ($k_\omega a \leq 0,30$) максимум интенсивности наблюдается при $\varphi_{in \max} = \pi/4$ и произвольной эллиптичности падающей волны. В области $0,30 < k_\omega a \leq 0,57$ необходимо использовать линейно поляризованное излучение с азимутом поляризации $\varphi_{in \max}$, зависимость которого от $k_\omega a$ представлена на рисунке 1.3. В области $k_\omega a > 0,57$ оптимальным является использование линейно поляризованной волны с положением плоскости поляризации, когда она перпендикулярна оси частицы ($\varphi_{in \max} = \pi/2$). Для малахитового зеленого оптимальными параметрами всегда являются падение линейно

поляризованной волны с плоскостью поляризации проходящей через ось цилиндрической частицы ($\varphi_{in \max} = 0$).

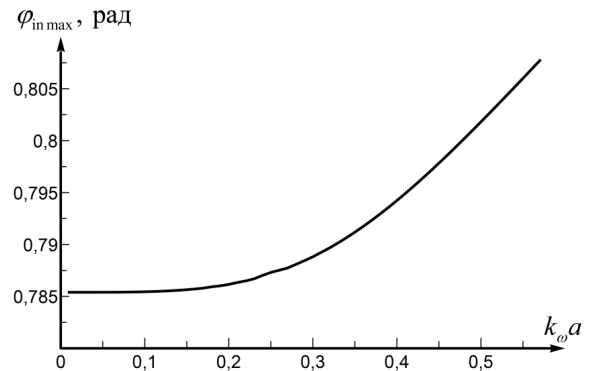


Рисунок 1.3 – Зависимость оптимального азимута поляризации от радиуса основания цилиндрической частицы для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$

В области малых значений параметра $k_\omega a$ результаты оптимизации находятся в соответствии с оптимальными параметрами, найденными аналитически в подразделе 1.3. В данной области максимальная плотность мощности для типов анизотропии $\chi_3^{(2)}$ и $\chi_4^{(2)}$ достигается не для одной пары значений $\varphi_{in \max}$, σ_{\max} (что наблюдается для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}$, $\chi_2^{(2)}$ и малахитового зеленого), а для областей сочетаний данных параметров указанных в подразделах 1.3.3 и 1.3.4 соответственно. Отметим особенность, что на границе применимости приближенных формул, полученных в предыдущем разделе, отклонение приближенных выражений для цилиндрических функций Бесселя составляет 5%, для максимальной по направлению наблюдения φ плотности мощности порядка 1–6%, а для значений оптимальных углов наблюдения φ_{\max} не более 2% для всех рассмотренных типов анизотропии.

Максимальные значения вспомогательной плотности мощности во всей рассматриваемой области изменения радиуса основания цилиндра удобно обозначить как

$$s_i = \max_{k_\omega a, \varphi, \sigma, \varphi_{in}} [S^{(2\omega)}], \quad (1.39)$$

где индекс i принимает значения $\chi_1^{(2)}$, $\chi_2^{(2)}$, $\chi_3^{(2)}$, $\chi_4^{(2)}$ или МЗ. Эти величины и значения оптимального радиуса основания частицы, при которых достигается максимум вспомогательной плотности мощности, приведены в таблице 1.2. Как видно, максимальное значение для типа анизотропии $\chi_3^{(2)}$ больше максимальных значений для остальных рассмотренных типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ на порядок. Чтобы сравнить поведение зависимостей оптимальных плотностей мощности от

радиуса основания частицы, построим графики нормированных вспомогательных плотностей мощности от радиуса (рисунок 1.4, а), которые отдельно для каждого из типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ определим как

$$s_{\text{norm max}}^{(2\omega)} = \max_{\varphi, \sigma, \varphi_{\text{in}}} [s^{(2\omega)}] / s_i. \quad (1.40)$$

Таблица 1.2 – Максимальные значения вспомогательной плотности мощности s_i и соответствующие им оптимальные значения радиуса частицы

Параметр	Значения параметра				
Тип анизотропии (i)	$\chi_1^{(2)}$	$\chi_2^{(2)}$	$\chi_3^{(2)}$	$\chi_4^{(2)}$	МЗ
s_i	0,168	0,333	1,342	0,250	0,202
$k_{\omega}a$	11,346	7,493	11,190	0,01	7,493

На данных графиках видно, что поведение кривых для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$ и малахитового зеленого идентично, так как линии совпадают в пределах выбранной точности результатов. Такого рода совпадение также наблюдается на зависимости оптимального угла наблюдения от радиуса основания частицы (рисунок 1.4, б). Аналитически можно показать, что при выбранной в данной работе схеме задачи, падении плоско

поляризованной волны с азимутом поляризации $\varphi_{\text{in}} = 0$ (эти параметры являются оптимальными для малахитового зеленого), за генерацию второй гармоники отвечает только компонента $\chi_2^{(2)}$ тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости [12]. Как следствие, графики на рисунок 1.4 для малахитового зеленого и типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$ совпадают. Отметим, что пространственное распределение излучения в общем случае параметров σ и φ_{in} для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$ и малахитового зеленого не совпадает, что, например, можно видеть на диаграммах направленности на рисунке 1.2, б и рисунке 1.2, д. Для данных типов тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ максимальная вспомогательная плотность мощности практически не изменяется в области $k_{\omega}a > 4$, это означает, что максимальная плотность мощности $S^{(2\omega)}$ пропорциональна $(k_{\omega}a)^2$.

Для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}$ и $\chi_3^{(2)}$ поведение максимальной вспомогательной плотности мощности подобно поведению, описанному выше для типа анизотропии $\chi_2^{(2)}$, но приблизительно стационарные значения достигаются в области $k_{\omega}a > 6$.

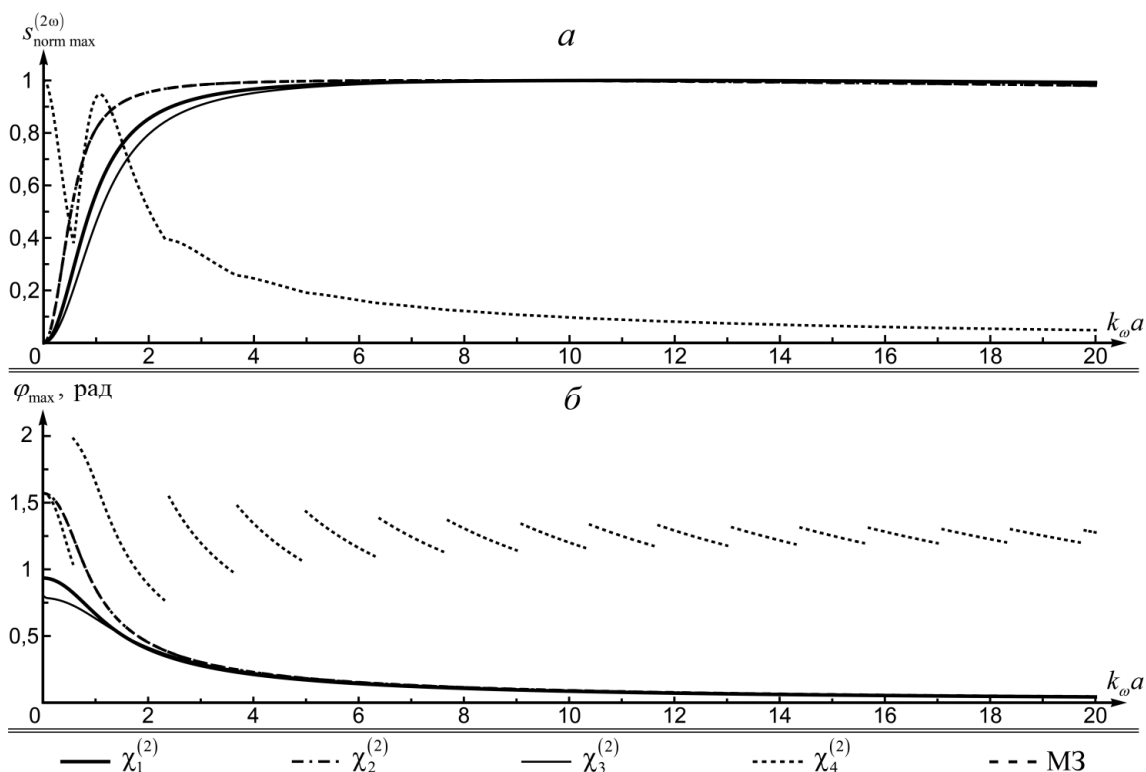


Рисунок 1.4 – (а) Зависимости нормированной максимальной вспомогательной плотности мощности от радиуса основания цилиндрической частицы для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}$, $\chi_2^{(2)}$, $\chi_3^{(2)}$, $\chi_4^{(2)}$ и малахитового зеленого, (б) зависимости оптимального угла наблюдения от радиуса основания частицы

Увеличение радиуса основания цилиндрической частицы для типов анизотропии $\chi_1^{(2)}$, $\chi_2^{(2)}$, $\chi_3^{(2)}$ и малахитового зеленого приводит к плавному уменьшению оптимального угла наблюдения φ_{\max} (рисунок 1.4, б). На диаграммах направленности (рисунок 1.2) это проявляется в виде двух главных симметричных лепестков, которые приближаются к оси Ox по мере увеличения параметра $k_0 a$.

Для типов анизотропии $\chi_2^{(2)}$ и $\chi_3^{(2)}$ вектор $\mathbf{f}^{(2\omega)}$ (1.5) содержит только по одному слагаемому, включающему только цилиндрическую функцию Бесселя первого порядка от аргумента qa . Эта функция Бесселя обладает глобальным максимумом в точке $qa = 1,841$. Если предположить, что плотность генерируемой мощности достигает своего максимума, когда функция Бесселя максимальна, то можно определить выражение для оптимального угла наблюдения по формуле

$$\varphi_{\max} = \pm \arccos \left(\frac{4(1 + \xi^2) - 1,841^2 (k_0 a)^{-2}}{8\xi} \right), \quad (1.41)$$

которая определена для $k_0 a \geq 0,921 / (1 + \xi)$. Данное выражение справедливо с отклонением менее 1% от численно найденных оптимальных углов φ_{\max} для типов анизотропии $\chi_2^{(2)}$ и $\chi_3^{(2)}$ в областях $k_0 a \geq 3$ и $k_0 a \geq 6,4$ соответственно.

Для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ поведение максимальной вспомогательной плотности мощности $S^{(2\omega)}$ кардинально отличается: функция является убывающей в областях $k_0 a \in [0,01; 0,57) \cup (1,08; 20]$, а возрастает в области $k_0 a \in (0,57; 1,08)$. Если говорить о максимальной плотности мощности $S^{(2\omega)}$, то она возрастает во всей рассматриваемой области радиусов оснований. В области $k_0 a > 5$ максимальная вспомогательная плотность мощности обратно пропорциональна $k_0 a$, поэтому максимальная плотность мощности линейно возрастает при увеличении радиуса основания цилиндрической частицы. На графике зависимости оптимального угла наблюдения от радиуса частицы (рисунок 1.4, б) для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ можно видеть множество резких изменений оптимального угла. Это связано с тем, что для больших радиусов оснований диаграммы направленности имеют большое количество лепестков сравнимых размеров (рисунок 1.2), и максимальному значению плотности генерируемой мощности соответствуют различные лепестки для разных значений параметра $k_0 a$.

2 Генерация второй гармоники от линейной структуры из параллельных цилиндров

Рассмотрим падение электромагнитной волны на линейную структуру из периодически

расположенных параллельных цилиндров (рисунок 2.1). Волновой вектор исходной волны направлен вдоль оси Ox и перпендикулярен плоскости, в которой расположены оси цилиндров. Расстояние между осями – d , количество цилиндров в линейной структуре – N . Целью данного раздела является нахождение распределения генерируемого излучения от такой структуры и анализ энергетических характеристик. Генерация второй гармоники от каждого из цилиндров для такой схемы задачи происходит в плоскости Oxy [8], поэтому и для структуры из цилиндров справедлив аналогичный вывод.

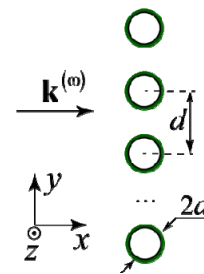


Рисунок 2.1 – Схема задачи о ГВГ от линейной структуры из цилиндрических частиц большой высоты

2.1 Решение задачи

Напряженность электрического поля от линейной структуры может быть определена с использованием принципа суперпозиции полей от отдельных цилиндров:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_N^{(2\omega)} &= 2\pi\mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} d_0 a h E_0^2 \times \\ &\times \sum_{j=1}^N \frac{\exp(ik_{2\omega} \rho_j)}{\rho_j} (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) = \\ &= 2\pi\mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} d_0 a h E_0^2 (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) \times \\ &\times \sum_{n=1-N/2}^{N/2} \frac{\exp(ik_{2\omega} (\rho + \frac{d}{2} \sin \varphi - nd \sin \varphi))}{\rho + \frac{d}{2} \sin \varphi - nd \sin \varphi}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где ρ – расстояние от центра структуры до точки наблюдения, вспомогательный вектор $\mathbf{f}^{(2\omega)}$ определяется выражением (1.5).

В дальней зоне сумму в формуле (2.1) можно упростить:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1-N/2}^{N/2} \frac{\exp(ik_{2\omega} (\rho + \frac{d}{2} \sin \varphi - nd \sin \varphi))}{\rho + \frac{d}{2} \sin \varphi - nd \sin \varphi} \approx \\ &\approx \frac{\exp(ik_{2\omega} \rho)}{\rho} \sum_{n=1-N/2}^{N/2} \exp(i(\frac{1}{2} - n)\Phi) = \\ &= \frac{\exp(ik_{2\omega} \rho)}{\rho} \frac{\sin(\frac{1}{2} N\Phi)}{\sin(\frac{1}{2} \Phi)}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь введено обозначение $\Phi = k_{2\omega} d \sin \varphi = 2\xi k_0 d \sin \varphi$. Численный критерий дальней зоны, где справедливо упрощение выше, следующий:

$\rho \gg Nd$. Теперь напряженность электрического поля генерируемого излучения от линейной структуры можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_N^{(2\omega)} &= 2\pi\mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} d_0 ah E_0^2 (1 - \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho) \times \\ &\times \mathbf{f}^{(2\omega)}(\varphi) \frac{\exp(ik_{2\omega}\rho) \sin(\frac{1}{2}N\Phi)}{\rho \sin(\frac{1}{2}\Phi)} = \\ &= \mathbf{E}^{(2\omega)} \frac{\sin(\frac{1}{2}N\Phi)}{\sin(\frac{1}{2}\Phi)}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\mathbf{E}^{(2\omega)}$ – вектор напряженности электрического поля второй гармоники от одного цилиндра, определяемая выражением (1.4). Тогда плотность генерируемой мощности от линейной структуры определяется через интенсивность генерируемого излучения от одного цилиндра $S^{(2\omega)}$ (1.6) как

$$S_N^{(2\omega)} = S^{(2\omega)} \cdot \frac{\sin^2(\frac{1}{2}N\Phi)}{\sin^2(\frac{1}{2}\Phi)}. \quad (2.4)$$

При описании явления дифракции на периодической решетке появляется аналогичный множитель, связанный с интерференцией волн от каждого из отверстий [15].

2.2 Анализ экстремумов плотности генерируемой мощности

В данном подразделе мы проанализируем выражение (2.4) для общего случая тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости и радиуса основания частиц.

Плотность генерируемой мощности от линейной структуры является произведением двух функций: плотности мощности от одного цилиндра и функции

$$f_{\text{структ}}(N, \Phi) = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}N\Phi)}{\sin^2(\frac{1}{2}\Phi)}. \quad (2.5)$$

Последняя обладает глобальными максимумами, равными N^2 при

$$\frac{1}{2}\Phi = \xi k_\omega d \sin \varphi = m\pi, \quad (2.6)$$

где $m \in \mathbb{Z}$ и глобальными минимумами, равными нулю при

$$\frac{1}{2}N\Phi = N\xi k_\omega d \sin \varphi = m'\pi, \quad (2.7)$$

где m' принимает значения $\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ (исключая $\pm N, \pm 2N, \pm 3N, \dots$). Между минимумами расположены локальные максимумы, значения которых при больших N пренебрежимо малы по сравнению с глобальными максимумами (составляют не более 5% [15]).

Интенсивность генерируемого излучения от линейной структуры из цилиндров достигает максимума в случае совпадения направлений наблюдения максимума интенсивности от одного цилиндра φ_{\max} и интерференционного максимума (2.6). Это условие можно представить следующим образом:

$$\xi k_\omega d \sin \varphi_{\max} = \pm m\pi, \quad (2.8)$$

где $m \in \mathbb{N}$. Здесь исключено значение $m = 0$, так как для выполнения условия (2.8) необходимо

иметь оптимальный угол наблюдения $\varphi_{\max} = 0, \pi$, а в данных направлениях генерация второй гармоники от цилиндрической частицы не происходит [12]. Значение интенсивности в данном оптимальном направлении в N^2 раз больше максимальной интенсивности при использовании одного цилиндра. В формуле (2.8) варьируемым параметром является расстояние между осями цилиндров $k_\omega d$, поэтому именно оно подбирается таким образом, чтобы выполнялось соотношение (2.8) совместно с условием $k_\omega d > 2k_\omega a$.

Плотность генерируемой мощности от линейной структуры обращается в нуль, когда не происходит генерация от одного цилиндра $S^{(2\omega)} = 0$ или при выполнении условия (2.7). Исходя из этого, можно заключить, что количество лепестков в распределении генерируемого излучения для линейной структуры больше, чем количество лепестков при генерации от одного цилиндра. Увеличение количества цилиндров в структуре приводит к увеличению количества лепестков и их сужению по аналогии с дифракционной решеткой.

Заключение

В данной работе аналитически найдены распределение плотности мощности излучения удвоенной частоты, направления наблюдения φ_{\max} ее максимума и выражения для полной генерируемой мощности в тонком цилиндрическом слое оптически нелинейного вещества большой высоты и малого радиуса. Для всех рассмотренных типов тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости, соответствующих типам анизотропии $\chi_{1-4}^{(2)}$, максимум энергетических характеристик наблюдается при использовании линейно поляризованного исходного излучения, но для типов анизотропии $\chi_3^{(2)}$ и $\chi_4^{(2)}$ существуют области сочетаний эллиптичности и азимута поляризации, когда генерируется максимальная интенсивность. При изучении пространственного распределения плотности генерируемой мощности обнаружено, что увеличение радиуса основания приводит к увеличению количества лепестков на диаграммах направленности. Для типов анизотропии $\chi_{1-3}^{(2)}$ и малахитового зеленого есть два главных лепестка, которые приближаются к оси Ox , а для типа анизотропии $\chi_4^{(2)}$ есть большее количество лепестков сравнимых интенсивностей.

Проведена численная оптимизация плотности генерируемой мощности для различных радиусов оснований цилиндрической частицы, в результате чего обнаружено, что для малахитового зеленого в диапазоне радиусов оснований от нанометров до микрометров необходимо использовать линейно поляризованное излучение с плоскостью поляризации, проходящей через ось

цилиндрической частицы, для генерации максимальной интенсивности. Найдено приближенное аналитическое выражение для оптимального угла наблюдения максимальной интенсивности для типов анизотропии $\chi_2^{(2)}$, $\chi_3^{(2)}$ и малахитового зеленого в области больших радиусов оснований. Решена задача о генерации второй гармоники от линейной структуры из параллельных цилиндров большой высоты. Найдены условия, при которых интенсивность максимальна, показано, что она пропорциональна квадрату числа частиц в структуре. Найдены направления наблюдения, в которых генерация второй гармоники от структуры не происходит.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shen, Y.R.* Optical Second Harmonic Generation at Interfaces / Y.R. Shen // *Annu. Rev. Phys. Chem.* – 1989. – Vol. 40. – P. 327–350.
2. *Size Dependence of Second-Harmonic Generation at the Surface of Microspheres* / S. Viarbitskaya [et al.] // *Phys. Rev. A.* – 2010. – Vol. 81, № 5. – P. 053850.
3. *Yang, N.* Angle-resolved second-harmonic light scattering from colloidal particles / N. Yang, W.E. Angerer, A.G. Yodh // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87, № 10. – P. 103902.
4. *Second Harmonic Generation from the Surface of Centrosymmetric Particles in Bulk Solution* / H. Wang [et al.] // *Chem. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 259, № 1–2. – P. 15–20.
5. *Yan, E.C.Y.* New Method for Determination of Surface Potential by Second Harmonic Generation / E.C.Y. Yan, Y. Liu, K.B. Eisenthal // *J. Phys. Chem. B.* – 1998. – Vol. 102, № 33. – P. 6331–6336.
6. *Mie, G.* Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen / G. Mie // *Annalen der Physik.* – 1908. – Vol. 330, № 3. – P. 377–445.
7. *Molecular Mie Model for Second Harmonic Generation and Sum Frequency Generation* / S. Wunderlich [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 84, № 23. – P. 235403.
8. *Шамына, А.А.* Генерация второй гармоники от тонкого цилиндрического слоя. I. Аналитическое решение / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // *Оптика и спектроскопия.* – 2019. – Т. 126, № 6. – С. 724–731.
9. *Roke, S.* Nonlinear optical scattering: The concept of effective susceptibility / S. Roke, M. Bonn, A.V. Petukhov // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 70, № 11. – P. 115106.
10. *Капшай, В.Н.* Генерация волн суммарной частоты в поверхностном слое сферической частицы / В.Н. Капшай, Е.Д. Головин, А.А. Шамына // *Проблемы физики, математики и техники.* – 2022. – № 3 (52). – С. 22–27.
11. *Капшай, В.Н.* Генерация второй гармоники от тонкого цилиндрического слоя. II. Анализ решения / В.Н. Капшай, А.А. Шамына // *Оптика и спектроскопия.* – 2019. – Т. 126, № 6. – С. 732–739.
12. *Шамына, А.А.* Генерация второй гармоники от тонкого цилиндрического слоя. III. Условия отсутствия генерации / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // *Оптика и спектроскопия.* – 2019. – Т. 126, № 6. – С. 740–747.
13. *Толкачёв, А.И.* Генерация второй гармоники – суммарной частоты в тонком сферическом слое. IV. Оптимизационный анализ / А.И. Толкачёв, А.А. Шамына, В.Н. Капшай // *Оптика и спектроскопия.* – 2021. – Т. 129, № 12. – С. 1568–1582.
14. *Daimon, M.* Measurement of the Refractive Index of Distilled Water from the Near-Infrared Region to the Ultraviolet Region / M. Daimon, A. Masumura // *Applied Optics.* – 2007. – Vol. 46, № 18. – P. 3811–3820.
15. *Иродов, И.Е.* Волновые процессы. Основные законы / И.Е. Иродов. – 7-е изд. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2001. – 265 с.

Поступила в редакцию 24.10.2022.

Информация об авторах

Толкачёв Антон Игоревич – аспирант

Шамына Антон Александрович – к.ф.-м.н.

Капшай Валерий Николаевич – к.ф.-м.н., доцент

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОГО АССИСТИРОВАНИЯ НА ПРОЦЕССЫ ГЕНЕРАЦИИ ЛЕТУЧИХ ПРОДУКТОВ ДИСПЕРГИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МИШЕНЕЙ НА ОСНОВЕ ПЭ И ИХ РЕАКЦИОННУЮ АКТИВНОСТЬ

М.А. Ярмоленко¹, А.В. Рогачев¹, А.С. Руденков¹,
В.А. Емельянов², С.А. Фролов¹, А.М. Михалко¹

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины
²ОАО «Интеграл», Минск

INFLUENCE OF LASER ASSISTANCE ON THE PROCESSES OF VOLATILE PRODUCTS DISPERSION GENERATION OF COMPOSITE TARGETS BASED ON POLYETHYLENE AND THEIR REACTIVITY

M.A. Yarmolenko¹, A.V. Rogachev¹, A.S. Rudenkov¹,
V.A. Emelyanov², S.A. Frolov¹, A.M. Mikhalko¹

¹Francisk Skorina Gomel State University
²JSC "INTEGRAL", Minsk

Аннотация. Определены закономерности влияния лазерного УФ излучения на процессы генерации, реакционную активность летучих продуктов электронно-лучевого диспергирования полиэтилена при введении в состав мишени наночастиц оксида цинка, меди. Показано, что при лазерном ассистирующем воздействии на композиционные мишени снижаются скорость роста покрытия, давление в вакуумной камере, возрастает реакционная активность генерируемых летучих фрагментов. При этом структура макромолекул покрытий характеризуется более низким содержанием транс-виниленовых связей, а их морфология – меньшей дисперсностью структурных образований, и, в случае диспергирования мишеней на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена, более высокой дефектностью.

Ключевые слова: электронно-лучевое диспергирование, лазерное ассистирование, полиэтилен, молекулярная структура, оксид цинка, медь.

Для цитирования: Влияние лазерного ассистирования на процессы генерации летучих продуктов диспергирования композиционных мишеней на основе ПЭ и их реакционную активность / М.А. Ярмоленко, А.В. Рогачев, А.С. Руденков, В.А. Емельянов, С.А. Фролов, А.М. Михалко // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 64–72. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_64. – EDN: QVDUKL

Abstract. The regularities of the laser UV radiation influence on the generation processes and the reactivity of volatile products of electron-beam dispersion of polyethylene, when zinc oxide and copper nanoparticles are introduced into the target, are determined. Under laser assisting action, the coating growth rate and the pressure in the vacuum chamber decrease, while the reactive activity of the generated volatile fragments increases. The coatings are characterized by a lower content of trans-vinylene bonds, the morphology – by less dispersion of structural formations. The coatings based on polyethylene of ultra-high molecular weight are characterized by higher defectiveness.

Keywords: electron beam dispersion, laser assistance, polyethylene, molecular structure, zinc oxide, copper.

For citation: Influence of laser assistance on the processes of volatile products dispersion generation of composite targets based on polyethylene and their reactivity / M.A. Yarmolenko, A.V. Rogachev, A.S. Rudenkov, V.A. Emelyanov, S.A. Frolov, A.M. Mikhalko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 64–72. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_64 (in Russian). – EDN: QVDUKL

Введение

Реализация высокой скорости осаждения нано- и микроразмерных покрытий из активной газовой фазы, генерируемой электронно-лучевым воздействием на полимерную мишень, возможна только при генерации летучих молекулярных фрагментов с высокой реакционной активностью. Определение условий и режимов генерации активных продуктов электронно-лучевого разрушения высокомолекулярных соединений представляет научный и практический интерес [1], [2].

В числе наиболее эффективных технологических приемов активного воздействия на процесс генерации летучих продуктов электронно-лучевого диспергирования является введение в состав полимерной мишени низкомолекулярных соединений, оказывающих каталитическое влияние на процессы деструкции макромолекул, лазерное ассистирование процесса диспергирования, создание плазменного разряда в генерируемых летучих продуктах деструкции мишени [3]. В [4] аргументирована высокая перспективность обработки коротковолновым лазерным излучением полимерной мишени, диспергируемой

потоком низкоэнергетических электронов. Под действием лазерного излучения возможна реализация фотоиницируемой электронной эмиссии, а также процессов фотохимической и фототермической активации, генерируемых летучих продуктов диспергирования. Дополнительная электронная эмиссия, имеющая место при обработке поверхности полимерной мишени электромагнитным излучением, снижает плотность адсорбированных мишенью электронов. Это снижает напряженность возникающего тормозящего электрического поля и, соответственно, повышает энергию электронов, действующих на мишень при ее диспергировании. Природа и кинетика процессов, протекающих при комплексном воздействии на мишень лазерного излучения и потока низкоэнергетических электронов, в значительной степени зависит от состава мишени [4]. Установление оптимального состава материала мишени с целью повышения реакционной активности генерируемых летучих продуктов диспергирования, реализация высоких скоростей осаждения покрытий с заданной молекулярной структурой и свойствами является важной практической задачей.

Целью настоящей работы является установление закономерностей влияния лазерного УФ излучения на процессы генерации летучих продуктов электронно-лучевого диспергирования полиэтилена при введении в состав мишени наночастиц оксида цинка, меди, определение влияния состава мишени на реакционную активность газовой фазы, молекулярную структуру и морфологию осаждаемых покрытий.

1 Методика эксперимента

Электронно-лучевое диспергирование полимерных мишеней в условиях лазерного ассистирования воздействия проводили по методике, представленной в [5]. Генерация летучих продуктов диспергирования осуществлялась при обработке мишени потоком электронов с энергией 800 – 1600 эВ и плотностью 0,01 – 0,03 А/см². Процесс производился при начальном давлении остаточных газов в вакуумной камере не более $4 \cdot 10^{-3}$ Па.

Одновременно с потоком электронов мишень подвергалась воздействию наносекундного лазерного излучения с $\lambda = 266$ нм. В качестве источника излучения был выбран лазер L-2137U+HG-5. Длительность импульса накачки в режиме модулированной добротности составляла 6 нс. Энергия лазерного импульса в системе генератор-усилитель в режиме модулированной добротности – 117 мДж. Диаметр пятна лазерного излучения – 7 мм. При осаждении покрытий в условиях лазерного ассистирования воздействия использовали мишени, площадь которых соответствовала площади пятна лазерного излучения. Выбор значения длины волны был произведен с целью возможного инициирования фотохимических реакций при воздействии на составную ми-

шень. При этом воздействие на мишень в вакууме лазерного излучения не вызывало образования летучих продуктов диспергирования.

Диспергированию подвергались мишени, представляющие механические смеси порошков высокомолекулярных соединений (полиэтилен (ПЭ) (марка 16803 – 070), сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) (CESTILENE HD 1000, Quadrant EPP; $5 \cdot 10^6$ г/моль)) с наночастицами оксида цинка (ZnO, (30 ± 10) нм (Aladdin Chemistry Co. Ltd)) или частицами меди (14 – 25 мкм, 99%; Aldrich). Массовое соотношение компонентов в смеси ПЭ + ZnO и СВМПЭ + ZnO изменялось в пределах от 1:0 до 1:1. Выбор ZnO в качестве наполнителя обусловлен тем, что энергия выхода электрона из таких частиц близка к энергии фотона лазерного излучения, что определяет возможность электронной эмиссии, которая снижает зарядку поверхностного слоя. Присутствие меди в поверхностном слое мишени повышает его электрическую проводимость, что также препятствует значительной зарядке полимерной мишени под действием потока электронов. Сравнительному анализу в работе подвергались покрытия с одинаковым значением эффективной толщины (в перерасчете по плотности исходного высокомолекулярного соединения толщина составляла 1 мкм).

Подложками при осаждении слоев служили пластины NaCl и пленки металлизированного лавсана (при регистрации ИК-спектров), пластины монокристалла кремния (при проведении микроскопических исследований).

Исследование морфологии покрытий осуществляли с использованием сканирующего зондового микроскопа Solver P47 PRO. В качестве зондов использовали кремниевые кантилеверы серии NSG11S с типичной силовой константой 5,5 Н/м и резонансной частотой 220 кГц.

ИК-спектроскопические исследования проводили с помощью ИК-Фурье спектрофотометра Vertex-70 (Bruker) и стандартной приставки на пропускание и приставки МНПВО (многократное нарушенное полное внутреннее отражение). В качестве отражающей призмы применяли кристалл KRS-5 (угол при основании – 45°). В случае проведения ИК МНПВО исследований порошков, вещество непосредственно насыпали на поверхность кристалла и прижимали резиновой прокладкой, имеющей со стороны кристалла отражающий алюминиевый слой. Для покрытий на основе полиэтилена в качестве внутреннего стандарта использовали полосу поглощения при 1465 см^{-1} ($\delta(\text{CH}_2)$) [6]. Для снижения влияния ориентационных процессов на определение упорядоченности сформированного полимерного слоя данный параметр оценивали по значению соотношения оптических плотностей полос поглощения при 1470 и 1465 см^{-1} [7].

Реакционную способность продуктов диспергирования оценивали по значению отношения $R = V_p / P_n$, где V_p – скорость осаждения; P_n – давление в вакуумной камере при диспергировании.

2 Результаты и их обсуждение

Установлено, что введение в состав мишеней из ПЭ наночастиц ZnO оказывает неоднозначное влияние на параметры процесса генерации летучих продуктов (давление в камере, скорость роста осажденных слоев) (рисунок 2.1).

При диспергировании композиционных мишеней с высоким массовым содержанием оксида цинка (ПЭ : ZnO – 1:1, 3:1) на ее поверхности

регистрируется образование черного карбонизированного слоя. Длительное воздействие потока электронов на образующийся карбонизированный слой приводит к снижению содержания в нем полимера, сопровождается его красным свечением, указывающим на высокую температуру в зоне воздействия. Экранирующее действие наночастиц ZnO является причиной резкого снижения скорости роста покрытия. При соотношении компонентов 1:1 – фиксируется рост давления в вакуумной камере (таблица 2.1), что свидетельствует о генерации более низкомолекулярных летучих продуктов диспергирования, характеризующихся низкой реакционной активностью.

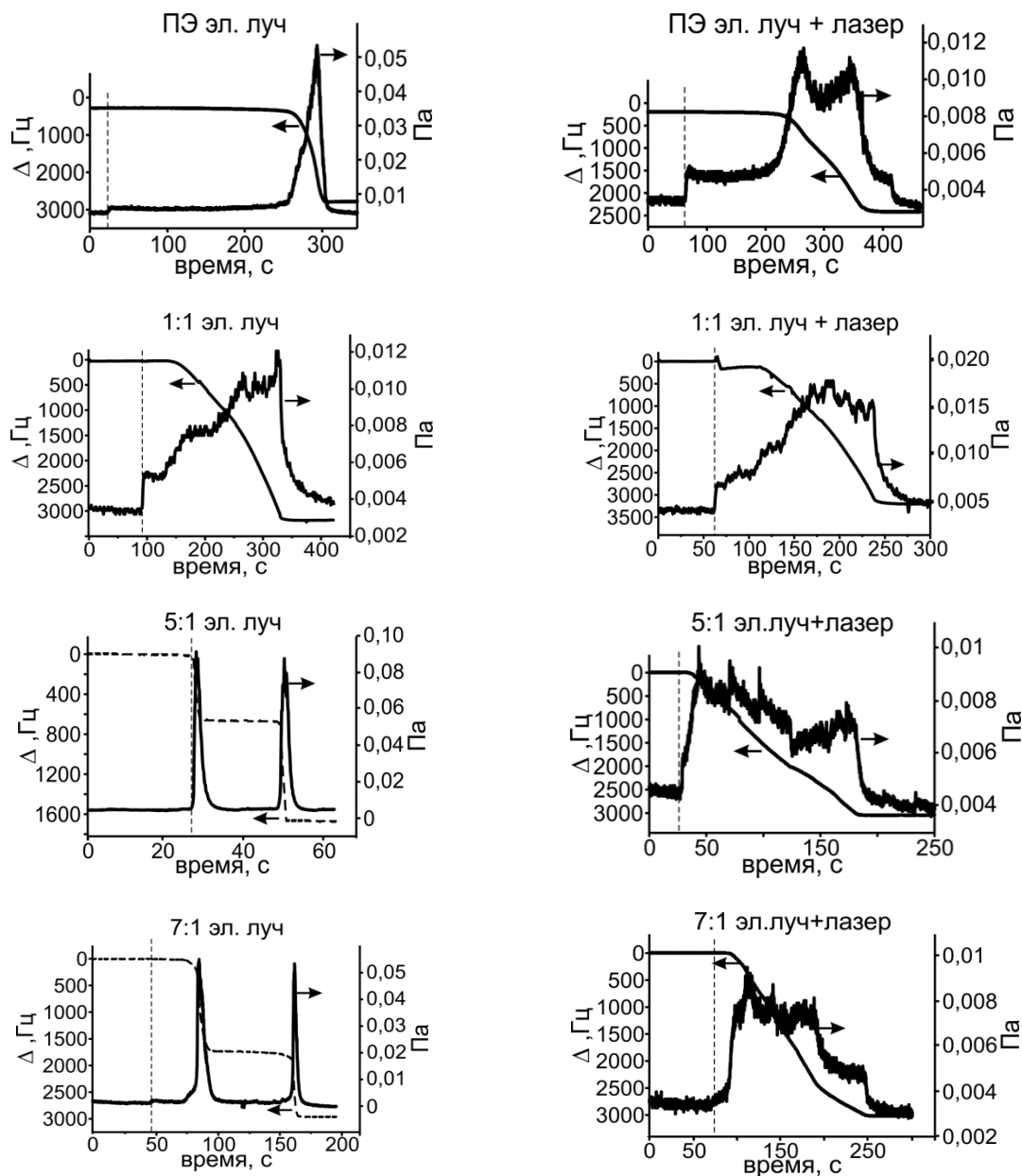


Рисунок 2.1 – Кинетические зависимости параметров процесса электронно-лучевого диспергирования композиционных мишеней в условиях лазерного ассилирующего воздействия ($\lambda = 266$ нм) и в условиях его отсутствия (пунктирной линией отмечено начало включения системы диспергирования)

Таблица 2.1 – Кинетические параметры электронно-лучевого диспергирования

Вид покрытия	Параметры нанесения		
	V_p , Гц/с	P_n , Па	$R=V_p/P_n$
ПЭ / СВМПЭ	60,1 / 169	0,052 / 0,029	1154 / 5827
ПЭ* / СВМПЭ*	14,0 / 113	0,010 / 0,026	1400 / 4346
ПЭ+ZnO (1:1) / СВМПЭ+ZnO (1:1)	17,0 / 57,5	0,091 / 0,044	187 / 1307
ПЭ+ZnO (1:1)* / СВМПЭ+ZnO (1:1)*	24,2 / 48	0,015 / 0,057	1613 / 842
ПЭ+ZnO (3:1) / СВМПЭ+ZnO (3:1)	19,2 / 31,5	0,010 / 0,025	1920 / 1260
ПЭ+ZnO (3:1)* / СВМПЭ+ZnO (3:1)*	15,1 / 94,2	0,007 / 0,027	2157 / 3488
ПЭ+ZnO (5:1) / СВМПЭ+ZnO (5:1)	449 / 71,3	0,084 / 0,033	5345 / 2160
ПЭ+ZnO (5:1)* / СВМПЭ+ZnO (5:1)*	19,2 / 127	0,008 / 0,034	2400 / 3735
ПЭ+ZnO (7:1) / СВМПЭ+ZnO (7:1)	111,0 / 106	0,054 / 0,043	2055 / 2465
ПЭ+ZnO (7:1)* / СВМПЭ+ZnO (7:1)*	20,4 / 142	0,007 / 0,036	2914 / 3944
ПЭ+ZnO (9:1) / СВМПЭ+ZnO (9:1)	201 / 145	0,031 / 0,040	6483 / 3850
ПЭ+ZnO (9:1)* / СВМПЭ+ZnO (9:1)*	271 / 135	0,063 / 0,043	4301 / 3139
ПЭ+Cu (4:1) / СВМПЭ+Cu (4:1)	76 / 223	0,058 / 0,044	1310 / 5048
ПЭ+Cu (4:1)* / СВМПЭ+Cu (4:1)*	15 / 192	0,009 / 0,037	1666 / 5189
ПЭ+Cu (2:1) / СВМПЭ+Cu (2:1)	56 / 243	0,024 / 0,046	2333 / 5282
ПЭ+Cu (2:1)* / СВМПЭ+Cu (2:1)*	31 / 209	0,051 / 0,044	607 / 4650

*Покрытие сформировано в условиях лазерного ассистирующего воздействия

При снижении содержания оксида цинка в полиэтиленовой мишени процесс диспергирования становится более стационарным, значения скорости роста покрытия и давления в вакуумной камере практически не зависят от состава мишени при массовом соотношении компонентов 5:1 и 7:1. При диспергировании таких мишеней достигаются значительно более высокие значения скорости роста и почти в 2 раза большие значения реакционной активности R (таблица 2.1).

Для процесса электронно-лучевого диспергирования мишеней ПЭ + ZnO в условиях лазерного ассистирующего воздействия характерны более низкие значения времени индукционного периода, скорости роста покрытия и давления в вакуумной камере в сравнении с аналогичными параметрами процесса в отсутствие УФ обработки (рисунок 2.1). При лазерном ассистировании электронно-лучевого диспергирования мишеней ПЭ + ZnO реализуются более высокие значения скоростей осаждения, но они меньше значений, регистрируемых при диспергировании в отсутствие лазерного ассистирования (таблица 2.1).

Рассмотрены кинетические особенности электронно-лучевого диспергирования СВМПЭ (рисунок 2.2).

Отличия параметров кинетики электронно-лучевого диспергирования таких мишеней от процесса диспергирования мишеней на основе ПЭ заключаются в реализации значительно более высокой скорости осаждения тонкого слоя, снижении длительности индукционного периода. Воздействие лазерного УФ излучения на диспергируемую потоком электронов мишень на основе СВМПЭ, в отличие от аналогичной обработки мишени на основе ПЭ, не всегда сопровождается

снижением давления генерируемой газовой фазы (таблица 2.1).

Реакционная активность летучих продуктов диспергирования мишеней СВМПЭ + ZnO при массовом содержании оксида цинка менее 50%, как правило, более высокая при использовании лазерного ассистирования.

Введение в состав мишени меди уменьшает в 1,5 – 2,0 раза время индукционного периода, и в случае диспергирования мишени на основе СВМПЭ заметно увеличивает значение скорости осаждения (таблица 2.1). При относительно низком содержании меди в мишени (когда экранирование поверхности диспергирования медными частицами незначительно) летучие продукты характеризуются высокой реакционной активностью. Лазерное ассистирующее воздействие не снижает значения R , однако скорость осаждения, как и в случае мишеней, содержащих оксид цинка, значительно ниже.

Следует отметить, что при диспергировании полиметилметакрилата и полиэтилентерефталата в условиях лазерного ассистирования регистрируется повышение скорости осаждения и давления, что находит объяснение с позиций снижения зарядки поверхности мишени вследствие фотостимулированной электронной эмиссии и дополнительного термического инициирования деструкции макромолекул когерентным излучением [4].

Наиболее вероятной причиной установленных особенностей влияния лазерного ассистирования на диспергирование полиэтилена является изменение химического состава и структуры мишени при воздействии ультрафиолетового излучения. Протекающие процессы разрыва химических

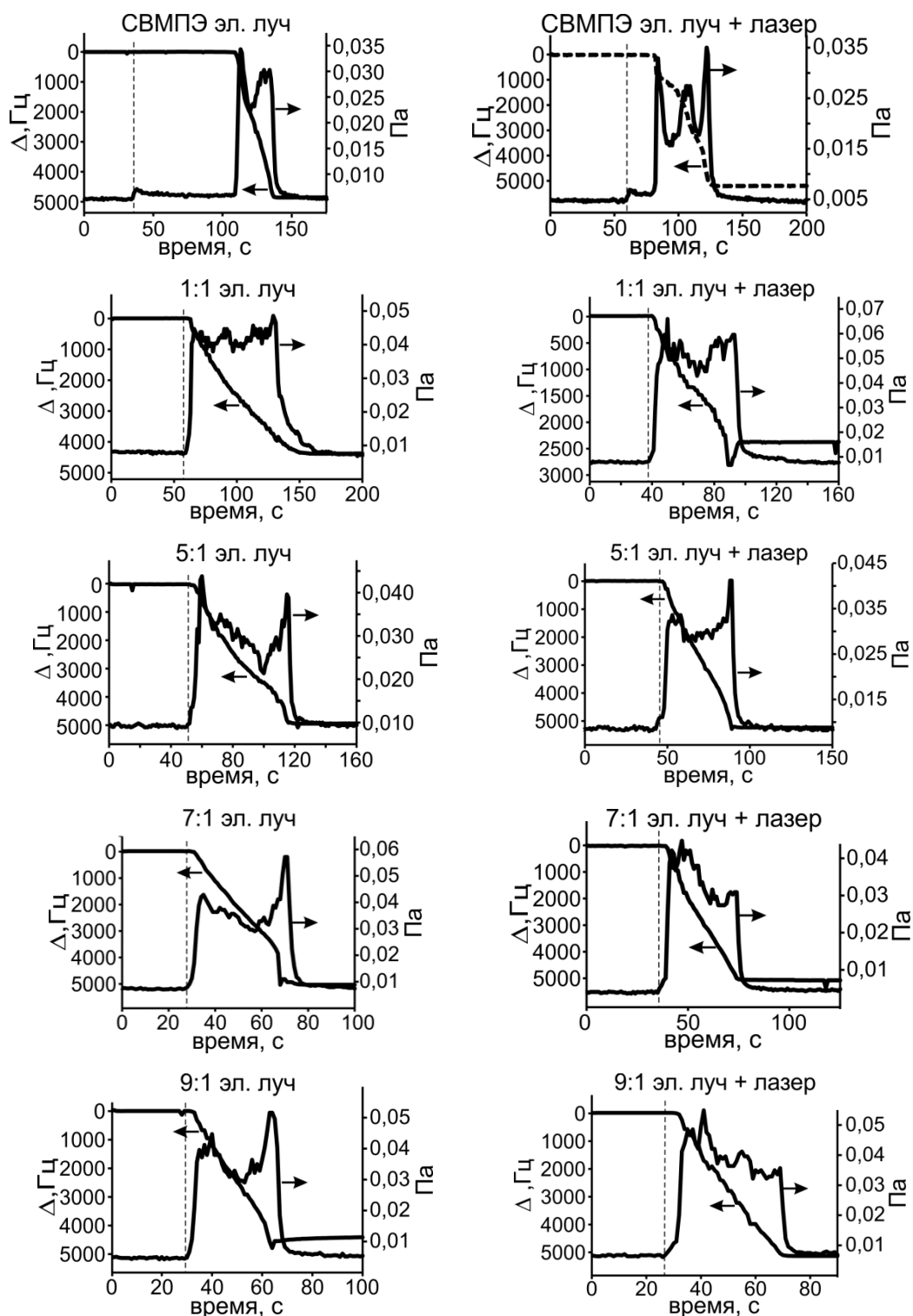


Рисунок 2.2 – Кинетические зависимости процесса электронно-лучевого диспергирования композиционных мишеней в условиях лазерного ассистирующего воздействия ($\lambda = 266$ нм) и в условиях его отсутствия

связей, радикальные реакции влияют на состав генерируемых летучих продуктов диспергирования. В результате изменяется стойкость полимера к воздействию электронов и молекулярная структура осаждаемых покрытий. Из представленных в таблице 2.2 результатов ИК-спектро-

скопических исследований следует, что влияние УФ лазерного излучения на молекулярную структуру осаждаемого покрытия в наибольшей степени проявляется в заметном снижении ненасыщенности, в частности *транс*-виниленовой. Образование подобного типа ненасыщенности

может быть инициировано обработкой растущего слоя потоком заряженных частиц, упруго отраженными электронами. В этой связи можно было предположить, что фиксируемые изменения в молекулярной структуре осаждаемого тонкого слоя в условиях лазерного ассистирующего воздействия, являются следствием снижения давления летучих продуктов диспергирования, образования молекулярных фрагментов с большей молекулярной массой. При этом молекулярная структура покрытий, осажденных из продуктов

диспергирования мишеней на основе СВМПЭ, практически не изменяется при использовании дополнительной лазерной обработки. Концентрация вводимых в мишень наночастиц ZnO, меди сказывается на содержании концевых двойных связей (особенно при диспергировании мишеней на основе ПЭ).

Особенности молекулярной структуры макромолекул проявляются в морфологии образующихся слоев (рисунки 2.3–2.6).

Таблица 2.2 – Параметры ИК-спектров сформированных покрытий

Вид покрытия	частота, см ⁻¹			
	1473 / 1465	1378 -CH ₃	965 -CH = CH-	908 -CH = CH ₂
ПЭ / СВМПЭ	0,78 / 0,72	0,098 / 0,095	0,075 / 0,075	0,079 / 0,069
ПЭ* / СВМПЭ*	0,74 / 0,80	0,15 / 0,081	0,165 / 0,088	0,029 / 0,077
ПЭ+ZnO (1:1) / СВМПЭ+ZnO (1:1)	0,59 / 0,62	0,27 / 0,105	0,186 / 0,138	0,102 / 0,032
ПЭ+ZnO (1:1)* / СВМПЭ+ZnO (1:1)*	0,62 / 0,67	0,20 / 0,08	0,148 / 0,126	0,079 / 0,05
ПЭ+ZnO (3:1) / СВМПЭ+ZnO (3:1)	0,56 / 0,47	0,37 / 0,138	0,107 / 0,146	0,137 / 0,029
ПЭ+ZnO (3:1)* / СВМПЭ+ZnO (3:1)*	0,57 / 0,65	0,18 / 0,088	0,036 / 0,141	0,105 / 0,037
ПЭ+ZnO (5:1) / СВМПЭ+ZnO (5:1)	0,70 / 0,69	0,16 / 0,087	0,097 / 0,114	0,171 / 0,047
ПЭ+ZnO (5:1)* / СВМПЭ+ZnO (5:1)*	0,54 / 0,74	0,20 / 0,074	0,021 / 0,113	0,085 / 0,058
ПЭ+ZnO (7:1) / СВМПЭ+ZnO (7:1)	0,63 / 0,73	0,24 / 0,086	0,077 / 0,093	0,165 / 0,083
ПЭ+ZnO (7:1)* / СВМПЭ+ZnO (7:1)*	0,57 / 0,77	0,19 / 0,11	0,027 / 0,083	0,122 / 0,061
ПЭ+ZnO (9:1) / СВМПЭ+ZnO (9:1)	0,46 / 0,73	0,31 / 0,078	0,137 / 0,102	0,075 / 0,075
ПЭ+ZnO (9:1)* / СВМПЭ+ZnO (9:1)*	0,54 / 0,72	0,23 / 0,098	0,038 / 0,088	0,119 / 0,071
ПЭ+Cu (4:1) / СВМПЭ+ Cu (4:1)	0,79 / 0,83	0,137 / 0,076	0,146 / 0,091	0,036 / 0,078
ПЭ+Cu (4:1)* / СВМПЭ+ Cu (4:1)*	0,80 / 0,94	0,121 / 0,084	0,123 / 0,091	0,044 / 0,086
ПЭ+Cu (2:1) / СВМПЭ+ Cu (2:1)	0,76 / 0,90	0,102 / 0,087	0,105 / 0,074	0,06 / 0,089
ПЭ+Cu (2:1)* / СВМПЭ+ Cu (2:1)*	0,78 / 0,88	0,106 / 0,108	0,100 / 0,08	0,082 / 0,075

*Покрытие сформировано в условиях лазерного ассистирующего воздействия

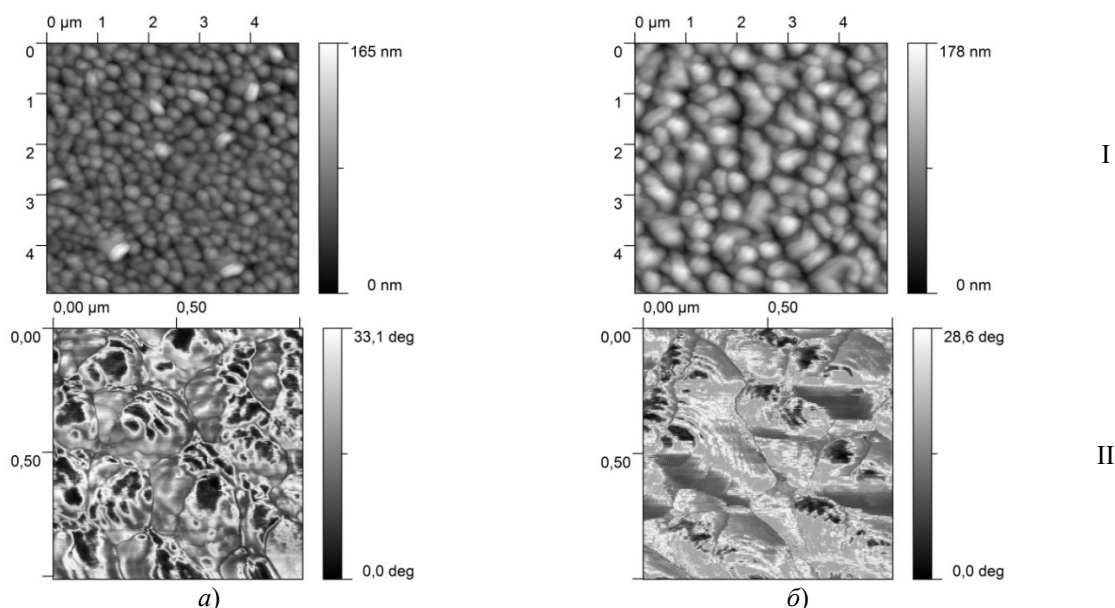


Рисунок 2.3 – Изображения АСМ покрытия ПЭ, сформированного в отсутствии (а) и в условиях лазерного ассистирования (б):

I – топография (5×5 мкм); II – фазовый контраст (1×1 мкм)

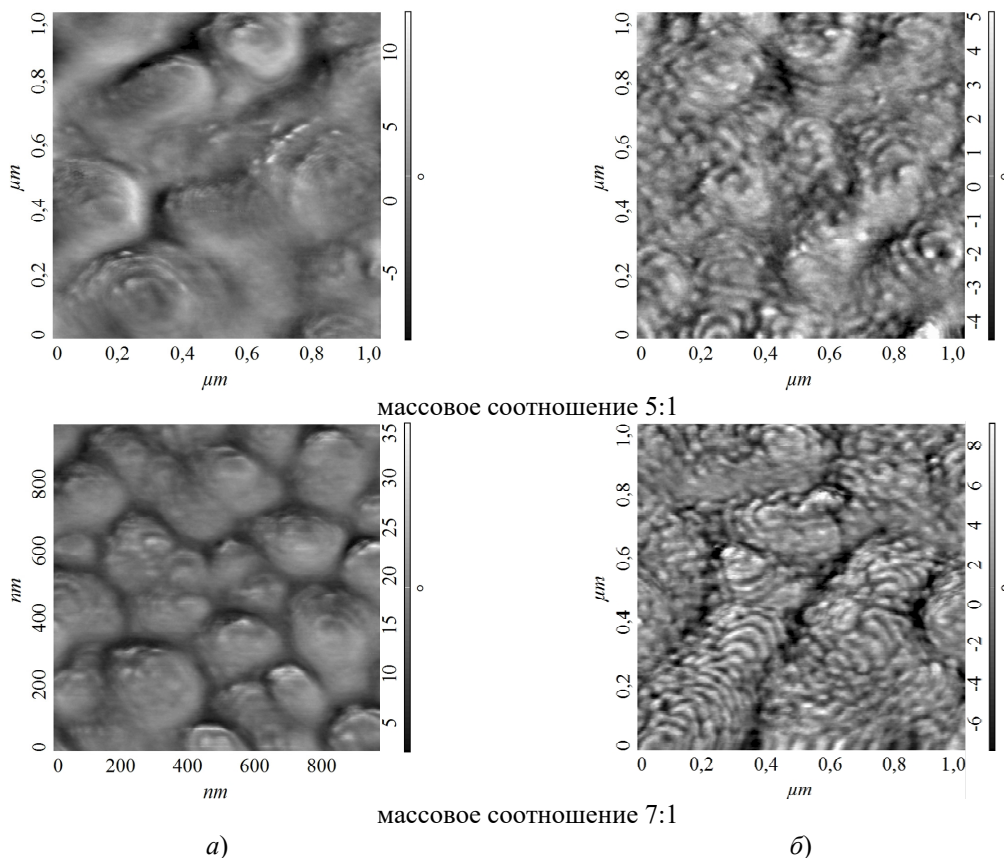


Рисунок 2.4 – Влияние массового соотношения ПЭ + ZnO в мишени на АСМ изображения покрытий (фазовый контраст), сформированных без (а) и в условиях лазерного ассистирования (б)

Лазерное УФ ассистирующее воздействие на диспергируемый потоком электронов порошок ПЭ сопровождается увеличением размера поверхностных образований, формирующих покрытие. Регистрируемые структуры являются составными, образованными из более мелких, средний размер которых ≈ 200 нм. На фазовом контрасте (рисунок 2.3, II) отчетливо видна структура подобных мелких образований, схожая со структурой пластинчатых кристаллов [8]. Для тонких слоев, осажденных в отсутствие лазерного ассистирующего воздействия на диспергируемую мишень, подобная слоистая структура поверхностных образований не является столь выраженной.

На АСМ изображениях покрытий, сформированных при диспергировании мишеней ПЭ + ZnO, такие слоистые структуры, возникающие в процессе складывания углеводородных фрагментов, хорошо заметны, что возможно лишь при определенной их длине [8]. Наиболее выраженные складчатые образования характерны для тонких слоев, осажденных в условиях лазерного ассистирующего воздействия с использованием смесей порошков полимера и оксида цинка с массовым соотношением 5:1 и 7:1.

Морфология покрытий, сформированных с использованием порошка СВМПЭ, имеет ряд существенных отличий от морфологии покрытий на основе ПЭ. Прежде всего, следует отметить отсутствие у них складчатых структур (рисунок 2.5). Структурирование тонкого слоя сопровождается появлением в объеме покрытия большого количества пор. Введение наночастиц оксида цинка в порошок СВМПЭ позволяет регулировать их размер и плотность. Влияние лазерного ассистирующего воздействия на морфологию покрытия не является выраженным, заметно проявляется только в снижении порообразования.

Морфология покрытий, полученных при использовании в качестве наполнителя материала мишени порошка меди, также имеет особенности (рисунок 2.6).

Покрытие имеет относительно более упорядоченную структуру, образованную мелкими сфероподобными элементами. Лазерное ассистирующее воздействие на стадии диспергирования вызывает незначительное повышение ее дисперсности. Для покрытий на основе СВМПЭ влияние меди не приводит к заметным изменениям морфологии в сравнении с влиянием наночастиц оксида цинка.

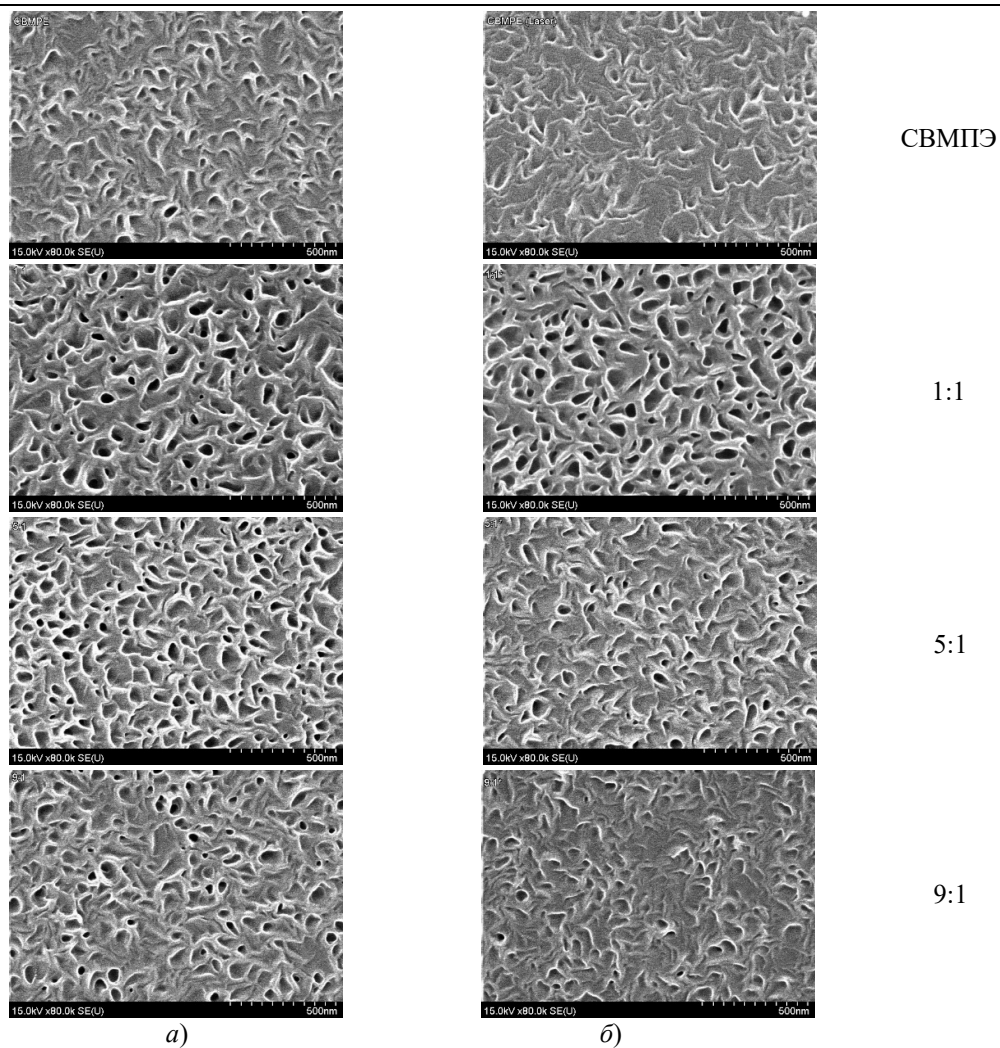


Рисунок 2.5 – РЭМ изображения покрытий, сформированных при диспергировании мишени СВМПЭ + ZnO при различном массовом соотношении при отсутствии (а) и в условиях лазерного ассистирующего воздействия (б)

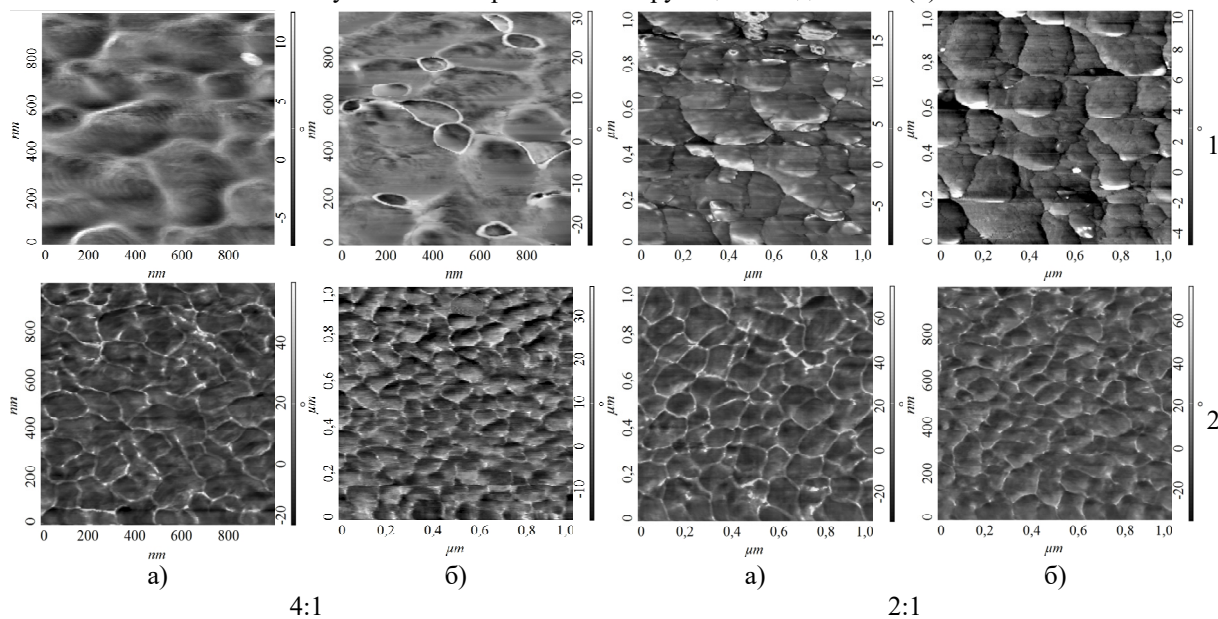


Рисунок 2.6 – Изображения АСМ (фазовый контраст) покрытия, сформированного диспергированием мишени Pt+Cu с различным составом компонент при отсутствии (а) и в условиях лазерного ассистирования (б)

Заключение

Определено влияние состава мишеней на основе ПЭ и СВМПЭ на параметры генерации, реакционную активность летучих продуктов электроннолучевого диспергирования в условиях лазерного ассистирования. Показано, что при введении в состав мишени 10–20 масс. % ZnO процесс диспергирования становится более стационарным, при этом достигаются значительно более высокие значения скорости роста и почти в 2 раза большие значения реакционной активности. Лазерное УФ ассистирование процесса диспергирования приводит к снижению скорости давления летучих продуктов, скорости роста покрытия, что объясняется изменением химического состава и структуры полимерной мишени при воздействии ультрафиолетового излучения. Влияние УФ лазерного излучения на молекулярную структуру, морфологию осаждаемого покрытия проявляется в заметном снижении *транс*-виниленовой ненасыщенности, увеличении размера поверхностных образований, формировании слоистых структур. При диспергировании мишеней СВМПЭ + ZnO в условиях лазерного ассистирования и его отсутствии складчатые структуры не формируются, в объеме покрытия регистрируются ячеистые образования, размер и дефектность которых зависит от содержания оксида цинка.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Микро- и нанокмпозиционные полимерные покрытия, осаждаемые из активной газовой фазы* / М.А. Ярмоленко, А.А. Рогачев, П.А. Лучников, А.В. Рогачев, Джанг Сянь Хун; под ред. А.В. Рогачева. – Москва: Радиотехника, 2016. – 424 с.
2. *Красовский, А.М.* Получение тонких пленок распылением полимеров в вакууме / А.М. Красовский, Е.М. Толстопятов. – Минск: Наука и техника, 1989. – 181 с.
3. *Ярмоленко, М.А.* Влияние технологических режимов формирования на структуру и свойства покрытий на основе полимеров, осаждаемых из активной газовой фазы (обзор). 1. Влияние условий и режимов генерации активной газовой фазы / М.А. Ярмоленко, А.А. Рогачев, А.В. Рогачев // *Проблемы физики, математики и техники.* – 2016. – № 2 (27). – С. 29–38.
4. *Особенности кинетики электронно-лучевого диспергирования полимеров в условиях*

лазерного ассистирования / М.А. Ярмоленко, А.В. Рогачев, А.С. Руденков, А.М. Михалко // *Проблемы физики, математики и техники.* – 2022. – № 3 (52). – С. 61–66.

5. *Ярмоленко, М.А.* Особенности электронно-лучевого диспергирования бромида серебра в условиях лазерного ассистирования, состав и морфология осаждаемых покрытий / М.А. Ярмоленко, А.А. Рогачев, А.В. Рогачев // *Наноматериалы и наноструктуры – XXI век.* – 2017. – Т. 8. – С. 32–38.

6. *Князев, В.К.* Кристаллические полиолефины. Строение и свойства / В.К. Князев. – Москва: Химия, 1970. – 472 с.

7. *Поляков, А.В.* Полиэтилен высокого давления. Научно-технические основы промышленного синтеза / А.В. Поляков, Ф.И. Дунтов, А.Э. Софиев. – Ленинград: Химия, 1988. – 200 с.

8. *Wunderlich, B.* *Macromolecular Physics: Crystal Structure, Morphology, Defects.* Front Cover / В. Wunderlich. – London: Academic Press, 1973. – 549 p.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь в рамках НИР «Разработка физико-химических основ радиационно-термо-электростатической активации процессов генерации летучих продуктов в технологии осаждения нанокмпозиционных полимер-органических покрытий», комплексное задание 2.2.04 «Разработка физико-химических основ радиационно-термо-электростатической активации процессов генерации летучих продуктов в технологии осаждения нанокмпозиционных полимер-органических покрытий» ГПНИ «Конвергенция-2025», подпрограмма «Микромир, плазма и Вселенная».

Поступила в редакцию 22.09.2022.

Информация об авторах

Ярмоленко Максим Анатольевич – д.т.н., доцент
Рогачев Александр Владимирович – чл.-корр. НАН Беларуси, д.х.м., профессор
Руденков Александр Сергеевич – к.т.н., доцент
Емельянов Виктор Андреевич – чл.-корр. НАН Беларуси, д.т.н., профессор
Фролов Сергей Анатольевич – стажер мл. науч. сотрудника
Михалко Алексей Михайлович – аспирант

О ЦЕНТРЕ ГРАФА, ОПРЕДЕЛЯЕМОГО ПОДГРУППАМИ ШМИДТА КОНЕЧНОЙ ГРУППЫ

П.В. Бычков¹, С.Ф. Каморников¹, В.Н. Тютянов²

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Международный университет «МИТСО», Гомель

ON THE CENTER OF A GRAPH DEFINED BY SCHMIDT SUBGROUPS OF A FINITE GROUP

P.V. Bychkov¹, S.F. Kamornikov¹, V.N. Tyutyaynov²

¹Francisk Skorina Gomel State University

²Gomel Branch of International University «MITSO», Gomel

Аннотация. Группой Шмидта называется ненильпотентная группа, все собственные подгруппы которой нильпотентны. Граф Шмидта конечной группы G – это простой граф с множеством вершин $\pi(G)$, в котором пара (p, q) является ребром тогда и только тогда, когда в G существует подгруппа Шмидта порядка, делящегося на pq . В работе изучается связь свойств графа Шмидта со свойствами группы.

Ключевые слова: конечная группа, простой граф, группа Шмидта, граф Шмидта, разрешимый граф, центр графа.

Для цитирования: Бычков, П.В. О центре графа, определяемого подгруппами Шмидта конечной группы / П.В. Бычков, С.Ф. Каморников, В.Н. Тютянов // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 73–79. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_73. – EDN: VICESH

Abstract. A Schmidt group is a non-nilpotent group whose proper subgroups are nilpotent. Schmidt graph of a finite group G is the prime graph with the vertex set $\pi(G)$ in which (p, q) is an edge if and only if G has a Schmidt subgroup whose order is divisible by pq . In the paper the relationship of Schmidt graph properties with group properties is studied.

Keywords: finite group, prime graph, Schmidt group, Schmidt graph, soluble graph, centre of graph.

For citation: Bychkov, P.V. On the center of a graph defined by Schmidt subgroups of a finite group / P.V. Bychkov, S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyaynov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 73–79. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_73 (in Russian). – EDN: VICESH

Введение

Все рассматриваемые в работе группы являются конечными.

В настоящее время имеется большое число работ, в которых свойства группы G анализируются в зависимости от свойств определенного простого неориентированного графа $\Gamma(G)$, множество вершин которого совпадает с множеством $\pi(G)$ всех простых делителей порядка группы G . На этом пути, в частности, выделены следующие типы простых неориентированных графов.

1. *Граф Грюнберга – Кегеля* (или *граф простых чисел*) $GK(G)$. Две вершины p и q графа $GK(G)$ смежны тогда и только тогда, когда в группе G имеется элемент порядка pq .

Граф введен в 1981 году Уильямсом в [1] со ссылкой на авторство Грюнберга и Кегеля. Данный граф тесно связан с решением известной проблемы распознавания групп по спектру (см., например, [2]).

2. *Граф разрешимости* $\Gamma_{sol}(G)$. Две вершины p и q графа $\Gamma_{sol}(G)$ смежны тогда и только тогда, когда в группе G найдется разрешимая подгруппа, порядок которой делится на pq .

Понятие графа разрешимости введено в работе [3] как обобщение графа Грюнберга – Кегеля. Очевидно, граф Грюнберга – Кегеля $GK(G)$ группы G является подграфом графа $\Gamma_{sol}(G)$, но при этом граф $\Gamma_{sol}(G)$ простой группы G всегда связан. Как следует из [4], граф разрешимости полезен для изучения структуры конечной группы и получения критериев ее непротототы.

Для простого числа $p \in \pi(G)$ пусть $A_p(G)$ обозначает группу $N_G(G_p) / G_p C_G(G_p)$.

3. *Силовский граф* $\Gamma_A(G)$. Пара (p, q) чисел $p, q \in \pi(G)$ образует ребро графа $\Gamma_A(G)$ тогда и только тогда, когда либо $p \in \pi(A_q(G))$, либо $q \in \pi(A_p(G))$.

Как следует из [5], одна из важных мотивировок изучения силовских графов связана с исследованием влияния свойств нормализаторов силовских подгрупп на строение группы (в частности, с изучением свойств решеточных формаций).

В данной работе для группы G вводится и анализируется граф Шмидта $\Gamma_{Sch}(G)$, ребра которого определяются наличием в G определенных подгрупп Шмидта.

4. *Граф Шмидта* $\Gamma_{Sch}(G)$. Две вершины p и q графа $\Gamma_{Sch}(G)$ смежны тогда и только тогда, когда в группе G найдется подгруппа Шмидта, порядок которой делится на pq .

Напомним, что *группой Шмидта* называется ненильпотентная группа, все собственные подгруппы которой нильпотентны. Простая проверка показывает, что любая ненильпотентная группа содержит по крайней мере одну *подгруппу Шмидта* (т. е. подгруппу, являющуюся группой Шмидта). Следуя [6], группу Шмидта с нормальной силовской p -подгруппой и ненормальной циклической силовской q -подгруппой будем называть $S_{\langle p,q \rangle}$ -группой.

Отметим, что ориентированный граф группы G , множество вершин которого совпадает с множеством $\pi(G)$ и пара (p, q) является ребром, идущим от вершины p к вершине q , тогда и только тогда, когда в G имеется $S_{\langle p,q \rangle}$ -подгруппа Шмидта, рассматривался в работах [7] и [8]. В [7] такой граф группы G называется *N -критическим* и обозначается $\Gamma_{N_c}(G)$. В отличие от N -критического графа Шмидта не различает $S_{\langle p,q \rangle}$ -группу и $S_{\langle q,p \rangle}$ -группу. Отметим также, что граф Шмидта не различает и простые группы. Например, для групп Матье M_{11} и M_{12} справедливо равенство $\Gamma_{Sch}(M_{11}) = \Gamma_{Sch}(M_{12})$.

В данной работе описываются простейшие свойства графа Шмидта группы G и изучается строение группы, для которой центр графа Шмидта и центр разрешимого графа группы G является пустым.

1 Используемая терминология

В работе используются стандартные определения и обозначения теории групп, которые могут быть найдены в [9].

Напомним, что *простым графом* Γ называется пара множеств $V(\Gamma)$ и $E(\Gamma)$, где $V(\Gamma)$ – множество *вершин* графа Γ , $E(\Gamma)$ – множество *ребер* графа Γ , т. е. множество неупорядоченных пар (a, b) различных элементов a и b из $V(\Gamma)$ (в этом случае говорят, что вершины a и b графа Γ *смежны*).

Конечный простой граф – это простой граф, содержащий конечное число вершин и ребер.

Порядком $|V(\Gamma)|$ графа Γ называется число всех его вершин.

Далее рассматриваются только конечные простые графы. *Степень вершины* a графа Γ есть количество смежных с ней вершин.

Два графа Γ_1 и Γ_2 называются *равными* ($\Gamma_1 = \Gamma_2$), если $V(\Gamma_1) = V(\Gamma_2)$ и $E(\Gamma_1) = E(\Gamma_2)$. Граф Γ_1 называется *подграфом* графа Γ_2 ($\Gamma_1 \subseteq \Gamma_2$), если $V(\Gamma_1) \subseteq V(\Gamma_2)$ и $E(\Gamma_1) \subseteq E(\Gamma_2)$. Граф Γ называется *объединением графов* Γ_1 и Γ_2 ($\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$), если $V(\Gamma) = V(\Gamma_1) \cup V(\Gamma_2)$ и $E(\Gamma) = E(\Gamma_1) \cup E(\Gamma_2)$.

Граф Γ называется *связным*, если для любой пары вершин a и b этого графа существует по крайней мере один путь, соединяющий их. *Диаметром* графа Γ называется наибольшая длина кратчайших путей между всеми парами его вершин.

Отношение связности, очевидно, есть отношение эквивалентности. Поэтому существует такое разбиение множества вершин графа на попарно непересекающиеся подмножества, что все вершины в каждом подмножестве связаны, а вершины из различных подмножеств не связаны. Каждое такое подмножество вершин графа вместе с ребрами, инцидентными этим вершинам, образует связный подграф. Следовательно, неориентированный граф представим единственным образом в виде объединения непересекающихся связных подграфов. Эти подграфы называются *связными компонентами* (или *компонентами связности*) графа.

Вершина графа Γ называется *центральной*, если она смежна со всеми другими вершинами Γ . Ясно, что для графа Γ с числом вершин n вершина a является центральной тогда и только тогда, когда степень ее равна $n - 1$.

Центром $Z(\Gamma)$ графа Γ называется множество всех его центральных вершин. Если порядок графа Γ равен 1, то полагаем по определению, что $Z(\Gamma) = \emptyset$.

Простой неориентированный граф, в котором каждая пара различных вершин смежна, называется *полным*. Понятно, что граф Γ является полным тогда и только тогда, когда $Z(\Gamma) = V(\Gamma)$.

Матрицей смежности вершин графа Γ с числом вершин n (пронумерованных числами от 1 до n) называется квадратная матрица размера $n \times n$, в которой на пересечении i -й строки и j -го столбца стоит 1, если вершины i и j смежны, и 0 – в противном случае. Понятно, что граф Γ обладает пустым центром тогда и только тогда, когда в каждой строке и каждом столбце матрицы смежности вершин графа Γ содержатся по крайней мере два нуля (один из этих нулей расположен на главной диагонали матрицы смежности вершин).

2 Предварительные результаты и примеры

Основное строение групп Шмидта установлено в работах [10], [11].

Лемма 2.1. Пусть S – группа Шмидта. Тогда справедливы следующие утверждения:

- (1) $\pi(S) = \{p, q\}$;
- (2) $S = [P] \langle a \rangle$, где P – нормальная силовская p -подгруппа группы S , $\langle a \rangle$ – ее силовская q -подгруппа, $\langle a^q \rangle \subseteq Z(S)$;
- (3) P – наименьшая нормальная подгруппа из S , фактор-группа по которой нильпотентна;
- (4) $P/\Phi(P)$ – минимальная нормальная подгруппа группы $S/\Phi(P)$, $\Phi(P) = P' \subseteq Z(S)$;
- (5) $\Phi(S) = Z(S) = P' \times \langle a^q \rangle$;
- (6) $C_p(a) = \Phi(P)$;
- (7) если $Z(S) = 1$, то $|S| = p^m q$, где m – показатель p по модулю q .

Предложение 2.1. Для любой группы G справедливы следующие утверждения:

- 1) $\Gamma_A(G) \subseteq \Gamma_{Sch}(G) \subseteq \Gamma_{sol}(G)$;
- 2) $\Gamma_{sol}(G) = GK(G) \cup \Gamma_{Sch}(G)$.

Доказательство. 1) Пусть $(p, q) \in E(\Gamma_A(G))$. Тогда либо $p \in \pi(A_q(G))$, либо $q \in \pi(A_p(G))$. Пусть для определенности $p \in \pi(A_q(G))$. Тогда в $N_G(G_q)$ найдется p -элемент x , который не централизует силовскую q -подгруппу G_q . Это означает, что подгруппа $G_q \langle x \rangle$ не является нильпотентной, а потому в ней найдется подгруппа Шмидта S с нормальной силовской q -подгруппой S_q . Следовательно, $\Gamma_A(G) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$.

Если S – подгруппа Шмидта группы G , то по лемме 1 она бипримарна, а значит, разрешима. Поэтому $\Gamma_{Sch}(G) \subseteq \Gamma_{sol}(G)$.

2) Ввиду утверждения 1) $\Gamma_{Sch}(G) \subseteq \Gamma_{sol}(G)$. Включение $GK(G) \subseteq \Gamma_{sol}(G)$ очевидно. Поэтому $GK(G) \cup \Gamma_{Sch}(G) \subseteq \Gamma_{sol}(G)$.

Пусть $(p, q) \in E(\Gamma_{sol}(G))$. Тогда по определению группа G содержит разрешимую подгруппу H , порядок которой делится на pq . Пусть $H_{\{p,q\}}$ – холлова $\{p, q\}$ -подгруппа из H . Если подгруппа $H_{\{p,q\}}$ нильпотентна, то $(p, q) \in E(GK(G))$. Если же подгруппа $H_{\{p,q\}}$ не является нильпотентной, то она содержит либо некоторую $S_{\langle p,q \rangle}$ -подгруппу, либо некоторую $S_{\langle q,p \rangle}$ -подгруппу. Следовательно, $(p, q) \in E(\Gamma_{Sch}(G))$. Таким образом, $\Gamma_{sol}(G) \subseteq GK(G) \cup \Gamma_{Sch}(G)$. \square

Пример 2.1. Пусть $G = L_2(31)$. Тогда $\pi(G) = \{2, 3, 5, 31\}$ и

$$E(\Gamma_{sol}(G)) = \{(2, 3), (2, 5), (3, 5), (3, 31), (5, 31)\}.$$

В то же время

$$E(\Gamma_{Sch}(G)) = \{(2, 3), (2, 5), (3, 31), (5, 31)\},$$

а граф Грюнберга – Кегеля $GK(G)$ имеет три компоненты связности $\{2\}$, $\{31\}$, $\{3, 5\}$.

Таким образом, для группы $G = L_2(31)$ графы $GK(G)$, $\Gamma_{Sch}(G)$ и $\Gamma_{sol}(G)$ попарно различны.

Пример 2.2. Пусть $G = M_{22}$. Тогда $|G| = 2^7 \cdot 3^2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11$ и $N_G(G_2) = G_2$. Отсюда следует, что $A_2(G) = N_G(G_2)/G_2C_G(G_2)$ – единичная группа. Кроме того, $N_G(G_7) = 7:3$, а потому $A_7(G) = N_G(G_7)/G_7C_G(G_7)$ – циклическая группа порядка 3. Таким образом, вершины 2 и 7 не являются смежными в силовском графе $\Gamma_A(G)$. С другой стороны, группа $G = M_{22}$ содержит подгруппу $2^3:L_3(2)$, а значит, и подгруппу Фробениуса $2^3:7$. Поэтому вершины 2 и 7 смежны в графе $\Gamma_{Sch}(G)$. Таким образом, в общем случае для простой группы G графы $\Gamma_A(G)$ и $\Gamma_{Sch}(G)$ различны.

Группа называется почти простой, если она обладает единственной минимальной нормальной подгруппой, которая является простой неабелевой группой.

Лемма 2.2. Пусть G – почти простая группа. Тогда граф $\Gamma_{Sch}(G)$ является связным и его диаметр не превосходит 5.

Доказательство. Пусть p и q – произвольные вершины графа $\Gamma_{Sch}(G)$. Ввиду основного результата работы [4] найдется такая последовательность вершин $p_1 = p, p_2, \dots, p_k = q$ графа $\Gamma_A(G)$, что для любого $i \in \{1, 2, \dots, k-1\}$ вершины p_i и p_{i+1} смежны. При этом $k \leq 5$. Тогда, как и в предложении 2.1, показывается, что для любого $i \in \{1, 2, \dots, k-1\}$ в группе G найдется подгруппа Шмидта, порядок которой делится на $p_i p_{i+1}$, т. е. вершины p_i и p_{i+1} смежны в графе $\Gamma_{Sch}(G)$. \square

Замечание 2.1. Пусть π – непустое множество простых чисел и G – почти простая πd -группа. Тогда из леммы 2.1 следует, что в G всегда найдется подгруппа Шмидта, порядок которой делится на простые числа p и q , где $p \in \pi$ и $q \in \pi'$.

Лемма 2.3. Если K и D – подгруппы группы G , подгруппа D нормальна в K и K/D – $S_{\langle p,q \rangle}$ -группа, то минимальное добавление L к подгруппе D в K содержит некоторую $S_{\langle p,q \rangle}$ -подгруппу.

Доказательство. По лемме 11.1 из [12] имеем $K = LD$ и $L \cap D \subseteq \Phi(L)$. Ввиду изоморфизма $K/D \cong L/L \cap D$ группа $L/L \cap D$ является $S_{\langle p,q \rangle}$ -группой. В частности, группа $L/L \cap D$ не

является нильпотентной и ее силовская p -подгруппа нормальна. Но тогда по лемме 4.4 из [12] подгруппа L также не является нильпотентной и ее силовская p -подгруппа нормальна. Отсюда следует, что L содержит некоторую $S_{<p,q>}$ -подгруппу. \square

Замечание 2.2. В общем случае минимальное добавление L в лемме 2.3 не является подгруппой Шмидта.

Лемма 2.4. Пусть H и N – подгруппы группы G , причем $N \triangleleft G$. Тогда справедливы следующие утверждения:

- 1) $\Gamma_{Sch}(H) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$;
- 2) $\Gamma_{Sch}(G/N) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$;

Доказательство.

1) Включения $V(\Gamma_{Sch}(H)) \subseteq V(\Gamma_{Sch}(G))$ и $E(\Gamma_{Sch}(H)) \subseteq E(\Gamma_{Sch}(G))$ очевидны. Поэтому $\Gamma_{Sch}(H) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$.

2) Включение $V(\Gamma_{Sch}(G/N)) \subseteq V(\Gamma_{Sch}(G))$ очевидно. Пусть $(p, q) \in E(\Gamma_{Sch}(G/N))$. Тогда в G/N найдется по крайней мере одна подгруппа Шмидта K/N , которая является либо $S_{<p,q>}$ -группой, либо $S_{<q,p>}$ -группой. Не нарушая общности рассуждений, будем полагать, что K/N – $S_{<p,q>}$ -подгруппа группы G/N . Тогда по лемме 2.3 группа G содержит некоторую $S_{<p,q>}$ -группу, т. е. $(p, q) \in E(\Gamma_{Sch}(G))$. \square

Предложение 2.2. Пусть G – группа и $\{\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k\}$ – разбиение множества $\pi(G)$ на попарно непересекающиеся непустые подмножества. Тогда следующие два условия равносильны:

1) группа G разлагается в прямое произведение своих холловых подгрупп $G_{\pi_1}, G_{\pi_2}, \dots, G_{\pi_k}$, причем каждая из них не разлагается в прямое произведение своих нетривиальных холловых подгрупп;

2) $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k$ – компоненты связности графа $\Gamma_{Sch}(G)$.

Доказательство. Пусть $G = G_{\pi_1} \times G_{\pi_2} \times \dots \times G_{\pi_k}$ и, кроме того, каждая из подгрупп $G_{\pi_1}, G_{\pi_2}, \dots, G_{\pi_k}$ не разлагается в прямое произведение своих нетривиальных холловых подгрупп. Тогда для любого $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ группа G представима в виде $G = G_{\pi_i} \times G_{\pi'_i}$. Отсюда следует, что каждая холлова $\{p, q\}$ -подгруппа группы G , где $p \in \pi_i$ и $q \in \pi'_i$, является нильпотентной. Поэтому из теоремы Холла следует, что в группе G не существует подгрупп Шмидта, порядок которых делится на pq , а значит, вершины из подмножеств π_i и π'_i графа $\Gamma_{Sch}(G)$ не связаны. Кроме того, так

как подгруппа G_{π_i} не разлагается в прямое произведение своих нетривиальных холловых подгрупп, то π_i – компонента связности графа $\Gamma_{Sch}(G)$.

Пусть теперь $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k$ – компоненты связности графа $\Gamma_{Sch}(G)$. Покажем, что в этом случае группа G разлагается в прямое произведение своих холловых подгрупп $G_{\pi_1}, G_{\pi_2}, \dots, G_{\pi_k}$, причем каждая из них не разлагается в прямое произведение нетривиальных холловых подгрупп.

Предположим, что это не так, и G – группа наименьшего порядка, для которой это не верно. Тогда ввиду леммы 2.2 группа G не является простой. Пусть N – минимальная нормальная подгруппа группы G . Не нарушая общности рассуждений, можем полагать, что $\pi(N) \cap \pi_1 \neq \emptyset$. Отсюда по лемме 2.2 имеем, что $N - \pi_1$ -группа.

Рассмотрим группу G/N . По лемме 2.4 имеем $\Gamma_{Sch}(G/N) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$. При этом, очевидно, множества π_2, \dots, π_k являются компонентами связности графа $\Gamma_{Sch}(G/N)$. Пусть $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m$ – все остальные компоненты связности графа $\Gamma_{Sch}(G/N)$ (если они существуют). Тогда $\sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \dots \cup \sigma_m = \pi_1$. Так как $|G/N| < |G|$, то ввиду выбора группы G группа G/N разлагается в прямое произведение своих холловых подгрупп $(G/N)_{\sigma_1}, \dots, (G/N)_{\sigma_m}, (G/N)_{\pi_2}, \dots, (G/N)_{\pi_k}$. Теперь из того, что $N - \pi_1$ -группа, G обладает нормальной холловой π_1 -подгруппой G_{π_1} и холловой π'_1 -подгруппой $G_{\pi'_1}$. Таким образом, $G = [G_{\pi_1}]G_{\pi'_1}$. Предположим, что подгруппа $G_{\pi'_1}$ не является нормальной в G . Тогда найдутся числа $p \in \pi_1$ и $q \in \pi'_1$ такие, что некоторый q -элемент x из $G_{\pi'_1}$ нормализует, но не централизует силовскую p -подгруппу G_p группы G . Отсюда следует, что ненильпотентная подгруппа $G_p < x >$ содержит некоторую $S_{<p,q>}$ -подгруппу, что по условию невозможно.

Следовательно, $G = G_{\pi_1} \times G_{\pi'_1}$. Снова применяя лемму 2.4, получаем, что $\Gamma_{Sch}(G_{\pi'_1}) \subseteq \Gamma_{Sch}(G)$. При этом непустые множества π_2, \dots, π_k являются компонентами связности графа $\Gamma_{Sch}(G_{\pi'_1})$. А так как $|G_{\pi'_1}| < |G|$, то ввиду выбора группы G группа $G_{\pi'_1}$ разлагается в прямое произведение своих холловых подгрупп $G_{\pi_2}, \dots, G_{\pi_k}$. \square

3 Граф Шмидта с пустым центром

В данном разделе изучаются группы, графы Шмидта которых обладают пустым центром. Понятно, что таким свойством обладает любая группа G , для которой граф $\Gamma_{Sch}(G)$ не является связным. Обратное утверждение неверно. На это указывает, в частности, следующий

Пример 3.1. Пусть $G = L_2(11)$. Тогда $V(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2, 3, 5, 11\}$ и $E(\Gamma_{Sch}(G)) = E(\Gamma_{Sch}(L_2(11))) = \{(2, 3), (2, 5), (5, 11)\}$. Следовательно, граф Шмидта группы G является связным, его диаметр равен 3, но при этом $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$.

В следующем предложении описывается подгрупповое строение разрешимой группы, для которой центр графа Шмидта является пустым.

Предложение 3.1. Пусть G – разрешимая группа. Тогда и только тогда $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$, когда в G для любого $p \in \pi(G)$ найдется отличное от p простое число $q \in \pi(G)$ такое, что холлова $\{p, q\}$ -подгруппа группы G является нильпотентной.

Доказательство. Пусть $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$. Тогда в каждой строке и каждом столбце матрицы смежности вершин графа $\Gamma_{Sch}(G)$ содержатся по крайней мере два нуля. Следовательно, для любого $p \in \pi(G)$ найдется отличное от p простое число $q \in \pi(G)$ такое, что группа G не содержит $S_{\langle p, q \rangle}$ -подгрупп и $S_{\langle q, p \rangle}$ -подгрупп. А так как по лемме 2.1 любая $S_{\langle p, q \rangle}$ -подгруппа и любая $S_{\langle q, p \rangle}$ -подгруппа является $\{p, q\}$ -подгруппой, то ввиду теоремы Холла все холловы $\{p, q\}$ -подгруппы группы G являются нильпотентными.

Пусть теперь в G для любого $p \in \pi(G)$ найдется отличное от p простое число $q \in \pi(G)$ такое, что холлова $\{p, q\}$ -подгруппа группы G является нильпотентной. Предположим, что вершины p и q графа $\Gamma_{Sch}(G)$ смежны. Тогда в G найдется по крайней мере одна подгруппа Шмидта S , которая является либо $S_{\langle p, q \rangle}$ -группой, либо $S_{\langle q, p \rangle}$ -группой. Так как группа G разрешима, то S содержится в некоторой холловой $\{p, q\}$ -подгруппе H группы G . Очевидно, H не является нильпотентной, что противоречит условию. \square

Имеет место следующий достаточный признак простоты группы.

Предложение 3.2. Если G – непримарная группа и $Z(\Gamma_{sol}(G)) = \emptyset$, то G является простой неабелевой группой.

Доказательство. Предположим, что $|\pi(G)| > 1$ и G не является простой неабелевой группой. Пусть N – ее минимальная нормальная

подгруппа. Если N – p -группа для некоторого $p \in \pi(G)$, то, очевидно, $p \in Z(\Gamma_{sol}(G))$, что невозможно.

Следовательно, $N = N_1 \times N_2 \times \dots \times N_k$, где $k \geq 1$ и N_1, N_2, \dots, N_k – изоморфные простые неабелевы группы. Пусть сначала $k \geq 2$. Ясно, что в этом случае $2 \in Z(\Gamma_{sol}(N))$. Если $\pi(N) = \pi(G)$, то $2 \in Z(\Gamma_{sol}(G))$, что невозможно. Пусть $r \in \pi(G) \setminus \pi(N)$ и $R \in Syl_r(G)$. Рассмотрим подгруппу $T = NR$. В силу аргумента Фраттини $T = NN_T(S)$ для некоторой подгруппы $S \in Syl_2(N)$. Понятно, что $N_T(S)$ содержит холлову $\{2, r\}$ -подгруппу в T , и, в частности, вершина 2 смежна с вершиной r . В силу произвольного выбора r получим, что $2 \in Z(\Gamma_{sol}(G))$. Последнее невозможно.

Таким образом, $k = 1$ и N – простая неабелева группа. Тогда $G/C_G(N)$ – почти простая группа. Рассмотрим два возможных случая.

1. Пусть $G/C_G(N)$ – простая группа. Тогда $G = N \times C_G(N)$. Ввиду выбора группы G подгруппа $C_G(N)$ неединична. Если подгруппа $C_G(N)$ не является разрешимой, ее порядок делится на 2, а потому $2 \in Z(\Gamma_{sol}(G))$. Пришли к противоречию с условием предложения. Если же подгруппа $C_G(N)$ разрешима, то $p \in Z(\Gamma_{sol}(G))$ для любого $p \in \pi(C_G(N))$. Снова пришли к противоречию с выбором группы G .

2. Пусть $G/C_G(N)$ не является простой группой. Пусть p – некоторое простое число, делящее порядок группы $G/NC_G(N)$. Для отличного от p простого числа $q \in \pi(G)$ пусть Q – некоторая силовская q -подгруппа из $NC_G(N)$. В силу аргумента Фраттини $G = NC_G(N)N_G(Q)$. Следовательно, в G найдется неединичный p -элемент, нормализующий q . Значит, $(p, q) \in E(\Gamma_{sol}(G))$.

Пусть H – минимальное добавление к $NC_G(N)$ в G . Тогда по лемме 11.1 из [12] $G = HNC_G(N)$ и $H \cap NC_G(N) \subseteq \Phi(H)$. Так как по теореме 4.241 из [13] группа внешних автоморфизмов группы N разрешима, то ввиду изоморфизма $G/NC_G(N) \cong H/H \cap NC_G(N)$ группа $H/H \cap NC_G(N)$ является разрешимой. Но тогда ввиду $H \cap NC_G(N) \subseteq \Phi(H)$ подгруппа H также является разрешимой. Поэтому $(p, r) \in E(\Gamma_{sol}(G))$ для любого простого $r \in \pi(G/NC_G(N))$. Отсюда следует, что $p \in Z(\Gamma_{sol}(G))$. Пришли к противоречию с тем, что $Z(\Gamma_{sol}(G)) = \emptyset$. \square

Группы, для которых центр графа Шмидта пуст, устроены сложнее.

Пример 3.2. Пусть $G = L_2(11) \times A$, где A – нильпотентная $\{2,3,5,11\}$ -группа. Тогда $V(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2,3,5,11\}$ и $E(\Gamma_{Sch}(G)) = E(\Gamma_{Sch}(L_2(11))) = \{(2,3), (2,5), (5,11)\}$. Следовательно, $\Gamma_{Sch}(G)$ – связный граф и $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$.

Отметим также следующее

Предложение 3.3. Пусть N – нормальная p -подгруппа группы G и $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$. Если $Z(\Gamma_{Sch}(G/N)) \neq \emptyset$, то $G = [G_p]G_{p'}$ и холлова $\{p, q\}$ -подгруппа группы G является нильпотентной для любой центральной вершины q графа $\Gamma_{Sch}(G/N)$.

Доказательство. Так как $Z(\Gamma_{Sch}(G/N)) \neq \emptyset$, то найдется вершина $q \in V(\Gamma_{Sch}(G/N))$ такая, что $(q, r) \in E(\Gamma_{Sch}(G/N))$ для любого $r \in \pi(G/N)$, отличного от q . Если $p \in V(\Gamma_{Sch}(G/N))$, то $Z(\Gamma_{Sch}(G)) \neq \emptyset$, что противоречит условию. Значит, $p \notin V(\Gamma_{Sch}(G/N))$, т. е. $|G/N|$ не делится на p . Отсюда N – нормальная силовская p -подгруппа группы G . По теореме Шура – Цассенхауса N дополняема в G и $G = [G_p]G_{p'}$. Кроме того, вершины p и q графа $\Gamma_{Sch}(G)$ не смежны. Поэтому холлова $\{p, q\}$ -подгруппа группы G является нильпотентной. \square

4 Центр графа Шмидта простой спорадической группы

Теорема 4.1. Пусть G – простая спорадическая группа. Тогда справедливы следующие утверждения:

- (1) если $G \in \{M_{11}, M_{12}, M_{22}, M_{23}, M_{24}, J_3, HS; M^cL, O'N, HN, Co_3, Co_2, BM, M\}$, то $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$;
- (2) если $G \in \{J_1, J_4, Ly, He, Co_1, Suz, Ru, Fi_{22}, Fi_{23}, Fi'_{24}\}$, то $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$;
- (3) если $G \in \{J_2, Th\}$, то $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2, 3\}$.

Доказательство. Пусть $p \in Z(\Gamma_{Sch}(G))$. Тогда ввиду предложения 2.1 $p \in Z(\Gamma_{sol}(G))$. Отсюда в силу теоремы 2 из [14] справедливы следующие утверждения:

- 1) $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \emptyset$ для любой группы $G \in \{M_{11}, M_{12}, M_{22}, M_{23}, M_{24}, J_3, HS; M^cL, O'N, HN, Co_3, Co_2, BM, M\}$;
- 2) $Z(\Gamma_{Sch}(G)) \subseteq \{2\}$ для любой группы $G \in \{J_1, J_4, Ly, He, Co_1, Suz, Ru, Fi_{22}, Fi_{23}, Fi'_{24}\}$;
- 3) $Z(\Gamma_{Sch}(G)) \subseteq \{2, 3\}$ для $G \in \{J_2, Th\}$.

Таким образом, остается проверить все группы из списков

$\{J_1, J_4, Ly, He, Co_1, Suz, Ru, Fi_{22}, Fi_{23}, Fi'_{24}\}$ и $\{J_2, Th\}$.

1. $G \simeq J_1$. Согласно [15, с. 36], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 19\}$ и группа G имеет максимальные подгруппы $2 \times A_5$, $7:6$, $11:10$ и $19:6$. Следовательно, вершина 2 смежна со всеми другими вершинами графа $\Gamma_{Sch}(G)$, а значит, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

2. $G \simeq J_4$. Как следует из [15, с. 188–190], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 23, 29, 31, 37, 43\}$ и группа J_4 содержит максимальные подгруппы $37:12$, $43:14$, $29:28$, $L_2(23):2$, $L_2(32):5$, $2^{11}:M_{24}$. Отсюда заключаем, что группа J_4 содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{37, 43, 29, 23, 11, 31, 3, 5, 7\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

3. $G \simeq Ly$. Тогда (см. [15, с. 174–175]) $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 31, 37, 67\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы $37:18$, $67:22$, $3McL:2$ и $G_2(5)$. Последняя группа, в свою очередь, имеет максимальные подгруппы $2^3:L_3(2)$ и $L_3(5):2$. Отсюда заключаем, что группа Ly содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{37, 67, 11, 31, 7, 3, 5\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

4. $G \simeq He$. Из [15, с. 104–105] следует, что $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 17\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы $2^{1+6}_+.L_3(2)$ и $S_4(4):2$. Подгруппа $S_4(4):2$, в свою очередь, содержит подгруппы $L_2(16):2$ и $(A_5 \times A_5):2$. Отсюда заключаем, что группа He содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{7, 17, 3, 5\}$, т. е. $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

5. $G \simeq Co_1$. Согласно [15, с. 180–187], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 13, 23\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы $2^{11}:M_{24}$ и $3Suz:2$. Отсюда заключаем, что группа Co_1 содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{3, 5, 7, 11, 23, 13\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

6. $G \simeq Suz$. Так как ввиду [15, с. 128–131] $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 13\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы $L_3(3):2$, $J_2:2$, $M_{12}:2$, то в ней найдутся подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{3, 13, 5, 7, 11\}$. Поэтому $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

7. $G \simeq Ru$. Согласно [15, с. 126–127], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 13, 29\}$. Кроме того, группа G содержит максимальные подгруппы $L_2(29)$, $L_2(13):2$, A_8 . Отсюда заключаем, что группа Ru содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{29, 13, 7, 3, 5\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

8. $G \simeq Fi_{22}$. Из [15, с. 156–163] следует, что $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 13\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы S_{10} , $2^{10} : M_{22}$ и $O_7(3)$. Кроме того, группа $O_7(3)$ содержит максимальную подгруппу $L_4(3) : 2_2$. Отсюда заключаем, что группа Fi_{22} содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{3, 5, 7, 11, 13\}$. Значит, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

9. $G \simeq Fi_{23}$. Ввиду [15, с. 177–179] имеем, что $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 23\}$ и группа G содержит максимальные подгруппы $L_2(17) : 2$, $2^{11} : M_{23}$ и $S_3 \times O_7(3)$. Кроме того, группа $O_7(3)$ содержит максимальную подгруппу $L_4(3) : 2_2$. Отсюда заключаем, что группа Fi_{23} содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{17, 3, 5, 7, 11, 23, 13\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

10. $G \simeq Fi'_{24}$. Согласно [15, с. 200–207], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 23, 29\}$. Кроме того, группа G содержит максимальные подгруппы Fi_{23} , $29 : 14$. Используя далее пункт 9, заключаем, что группа Fi'_{24} содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{3, 5, 7, 11, 13, 17, 23, 29\}$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2\}$.

11. $G \simeq J_2$. Согласно [15, с. 42–43], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7\}$ и группа G имеет максимальные подгруппы A_5 , $5^2 : D_{12}$ и $L_3(2) : 2$. Отсюда следует, что G для любого $p \in \{3, 5, 7\}$ содержит некоторую подгруппу Шмидта, порядок которой делится на $2p$, и G для любого $p \in \{2, 5, 7\}$ содержит некоторую подгруппу Шмидта, порядок которой делится на $3p$. Следовательно, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2, 3\}$.

12. $G \simeq Th$. Согласно [15, с. 176–177], $\pi(G) = \{2, 3, 5, 7, 13, 19, 31\}$ группа G содержит максимальные подгруппы $2^5 : L_5(2)$, $L_2(19) : 2$, ${}^3D_4(2) : 3$. Кроме того, группа ${}^3D_4(2)$ содержит максимальную подгруппу $13 : 4$. Отсюда заключаем, что группа Th содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $2p$, где $p \in \{3, 5, 7, 31, 19, 13\}$. Следовательно, $2 \in Z(\Gamma_{Sch}(G))$.

Так как группа G содержит максимальные подгруппы $31 : 15$, ${}^3D_4(2) : 3$, $L_2(19) : 2$, то отсюда заключаем, что группа Th содержит подгруппы Шмидта, порядок которых делится на $3p$, где $p \in \{31, 7, 13, 2, 19, 5\}$. Следовательно, $3 \in Z(\Gamma_{Sch}(G))$. Таким образом, $Z(\Gamma_{Sch}(G)) = \{2, 3\}$. \square

ЛИТЕРАТУРА

1. Williams, J.S. Prime graph components of finite groups / J.S. Williams // J. Algebra. – 1981. – Vol. 69, № 2. – P. 487–513.
2. Мазуров, В.Д. Распознавание конечных групп по множеству порядков их элементов / В.Д. Мазуров // Алгебра и логика. – 1998. – Т. 37, № 6. – С. 651–666.
3. Abe, S. A generalization of prime graphs of finite groups / S. Abe, N. Iiyori // Hokkaido Math. J. – 2000. – Vol. 29, № 2. – P. 391–407.
4. Amberg, B. Criteria for the solubility and non-simplicity of finite groups / B. Amberg, A. Carocca, L.S. Kazarin // J. Algebra. – 2005. – Vol. 285. – P. 58–72.
5. Kazarin, L.S. On the Sylow graph of a group and Sylow normalizers / L.S. Kazarin, A. Martinez-Pastor, M.D. Perez-Ramos // Isr. J. Math. – 2011. – № 186. – P. 251–271.
6. Княгина, В.Н. О конечных группах с некоторыми субнормальными подгруппами Шмидта / В.Н. Княгина, В.С. Монахов // Сиб. мат. журн. – 2004. – Т. 45, № 6. – С. 1316–1322.
7. Васильев, А.Ф. Арифметические графы и классы конечных групп / А.Ф. Васильев, В.И. Мурашко // Сиб. мат. журн. – 2019. – Т. 60, № 1. – С. 66–84.
8. Мурашко, В.И. Группы с заданными системами подгрупп Шмидта / В.И. Мурашко // Сиб. мат. журн. – 2019. – Т. 60, № 2. – С. 429–440.
9. Doerk, K. Finite soluble groups / K. Doerk, T. Hawkes. – Berlin – New York: Walter de Gruyter, 1992. – 891 p.
10. Шмидт, О.Ю. Группы, все подгруппы которых специальные / О.Ю. Шмидт // Мат. сб. – 1924. – Т. 31, № 3–4. – С. 366–372.
11. Гольфанд, Ю.А. О группах, все подгруппы которых специальные / Ю.А. Гольфанд // ДАН СССР. – 1948. – Т. 60, № 8. – С. 1313–1315.
12. Шеметков, Л.А. Формации конечных групп / Л.А. Шеметков. – М.: Наука, 1978. – 272 с.
13. Горенштейн, Д. Конечные простые группы. Введение в их классификацию / Д. Горенштейн. – Москва: Мир, 1985. – 352 с.
14. Kazarin, L.S. On centers of soluble graphs / L.S. Kazarin, V.N. Tyutyaynov // Сиб. электрон. матем. изв. – 2021. – Т. 18, № 2. – С. 1517–1530.
15. Atlas of finite groups / J.H. Conway, R.T. Curtis, S.P. Norton, R.A. Parker, R.A. Wilson. – Oxford: Clarendon Press, 1985. – 252 p.

Исследования второго и третьего авторов выполнены при финансовой поддержке БРФФИ и РНФ в рамках научного проекта № Ф23РНФ–237.

Поступила в редакцию 17.10.2022.

Информация об авторах

Бычков Павел Владимирович – к.ф.-м.н., доцент
 Каморников Сергей Федорович – д.ф.-м.н., профессор
 Тютянов Валентин Николаевич – д.ф.-м.н., профессор

КВАЗИОБРАТИМОСТЬ СИСТЕМ ОБСЛУЖИВАНИЯ С НЕСТАНДАРТНЫМИ ГРУППОВЫМИ ПЕРЕМЕЩЕНИЯМИ ЗАЯВОК

Ю.В. Малинковский

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

QUASIREVERSIBILITY OF QUEUING SYSTEMS WITH NONSTANDARD BATCH CUSTOMER MOTION

Yu.V. Malinkovskii

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Установлено полезное условие для квазиобратимости систем массового обслуживания.

Ключевые слова: цепь Маркова, система массового обслуживания, квазиобратимость, групповое поступление и обслуживание, производящие функции.

Для цитирования: Малинковский, Ю.В. Квазиобратимость систем обслуживания с нестандартными групповыми перемещениями заявок / Ю.В. Малинковский // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 80–83. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_80. – EDN: VRLSRJ

Abstract. A useful condition for the quasireversibility of queuing systems is established.

Keywords: Markov chain, queuing system, quasireversibility, batch arrival and batch service, generating functions.

For citation: Malinkovskii, Yu.V. Quasireversibility of queuing systems with nonstandard batch customer motion / Yu.V. Malinkovskii // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 80–83. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_80 (in Russian). – EDN: VRLSRJ

Введение

В [1] введена ассамблейно-трансферная (assemble-transfer) дисциплина перемещения запросов и при наличии дополнительного простейшего входящего потока, когда нет запросов, проведена характеристика стационарного распределения в форме произведения геометрических распределений. В [2] удалось провести характеристику в форме произведения смещенных геометрических распределений без дополнительного потока. Для решения подобных проблем в случае других распределений можно по каждой из схем [1] или [2] использовать результат приводимой ниже теоремы.

1 Постановка задачи и основной результат

В систему массового обслуживания, в которой содержится единственный экспоненциальный прибор с интенсивностью обслуживания μ , поступает стационарный поток без последствия (вообще говоря, неординарный). Наступление событий потока происходит с интенсивностью λ , при этом в момент осуществления n -го события потока поступает случайное число запросов X_{n+1} с распределением вероятностей

$$a(k) = P\{X_n = k\} \quad (n, k = 1, 2, \dots)$$

и конечным средним $m_A = \sum_{k=1}^{\infty} ka(k)$. Запросы об-

служиваются группами случайного размера Y_n для n -й группы с распределением $b(k) = P\{Y_n = k\}$ и конечным математическим ожиданием

$m_B = \sum_{k=1}^{\infty} kb(k)$. Если в момент окончания обслуживания очередной группы разыгранное значение выбираемой на обслуживание группы превосходит число ожидающих в очереди заявок, то на обслуживание берется неполная группа из всех оставшихся в очереди запросов. Предполагается, что $\{X_n\}$ и $\{Y_n\}$ – последовательности независимых, одинаково распределенных случайных величин, которые не зависят друг от друга и не зависят от процессов поступления и обслуживания. Число запросов в системе в момент времени t , обозначаемое $n(t)$, – цепь Маркова с непрерывным временем и фазовым пространством $\mathbb{Z}_+ = \{0, 1, 2, \dots\}$. Интенсивности ее перехода

$$q(n, n+k) = \lambda a(k), \quad k \geq 1, n \geq 0, \quad (1.1)$$

$$q(n, n-k) = \mu b(k), \quad 1 \leq k \leq n-1, n \geq 2, \quad (1.2)$$

$$q(n, 0) = \mu \bar{B}(n), \quad n \geq 1, \quad (1.3)$$

где $\bar{B}(n) = b(n) + b(n+1) + \dots = P\{X_1 \geq n\}$.

Известно, что условие

$$\lambda m_A < \mu m_B \quad (1.4)$$

является необходимым и достаточным для эргодичности цепи $n(t)$.

Пусть выполнено (1.4), тогда при любом начальном распределении цепи существуют не зависящие от него финальные вероятности

$$p(n) = \lim_{t \rightarrow \infty} P\{n(t) = n\} > 0, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \quad (1.5)$$

образующие единственное стационарное распределение процесса $n(t)$. При этом они удовлетворяют системе уравнений равновесия

$$\begin{aligned} (\lambda + \mu)p(n) &= \\ &= \lambda \sum_{k=0}^{n-1} p(k)a(n-k) + \mu \sum_{k=n+1}^{\infty} p(k)b(k-n), \quad n \geq 1, \\ \lambda p(0) &= \mu \sum_{k=1}^{\infty} p(k)\bar{B}(k). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Стандартные условия квазиобратимости (по отношению к естественному набору) марковского процесса $n(t)$ имеют форму

$$\mu p(n) = \lambda \sum_{k=0}^{n-1} p(k)a(n-k), \quad n \geq 1, \quad (1.7)$$

$$\lambda p(n) = \mu \sum_{k=n+1}^{\infty} p(k)b(k-n), \quad n \geq 1, \quad (1.8)$$

$$\lambda p(0) = \mu \sum_{k=1}^{\infty} p(k)\bar{B}(k). \quad (1.9)$$

Введем соответственно производящие функции стационарного распределения, распределения размеров поступающих групп и распределения размеров выбираемых на обслуживание групп как

$$P(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p(n)z^n,$$

$$\check{A}(z) = \sum_{k=1}^{\infty} a(k)z^k, \quad \check{B}(z) = \sum_{k=1}^{\infty} b(k)z^k.$$

Очевидно (1.7) эквивалентно равенству

$$\mu(P(z) - P(0)) = \lambda \check{A}(z)P(z). \quad (1.10)$$

Обозначим $\rho = \frac{\lambda}{\mu}$. Поскольку $P(1) = \check{A}(1) = 1$, то

полагая в (1.10) $z = 1$, получим $p(0) = P(0) = 1 - \rho$. Значит, для квазиобратимости $n(t)$ необходимо, чтобы $\rho < 1$ и $p(0) = 1 - \rho$. Следовательно, (1.10) можно переписать как

$$P(z) - 1 + \rho = \rho \check{A}(z)P(z). \quad (1.11)$$

Дифференцируя (1.11), получим

$$P'(z) = \rho \check{A}'(z)P(z) + \rho \check{A}(z)P'(z), \quad (1.12)$$

так как $P^{(n)}(z) = \rho \sum_{k=0}^n C_n^k \check{A}^{(k)}(z)P^{(n-k)}(z)$, $n \geq 1$, (1.13)

откуда

$$P^{(n)}(z) = \frac{\rho}{1 - \rho \check{A}(z)} \sum_{k=1}^n C_n^k \check{A}^{(k)}(z)P^{(n-k)}(z), \quad n \geq 1. \quad (1.14)$$

Напомним, что функция называется абсолютно монотонной на $(0, 1)$, если она бесконечно дифференцируема на $(0, 1)$, а все ее производные, включая нулевую (т. е. саму функцию), неотрицательны на $(0, 1)$. Пусть $\check{A}(z)$ – производящая функция вероятностного распределения на $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$, для чего, как известно [3], необходимо и достаточно, чтобы $\check{A}(z)$ была абсолютно монотонной в $(0, 1)$ и $\check{A}(0) = 0$, $\check{A}(1) = 1$. Перепишем (1.11) в виде

$$P(z) = \frac{1 - \rho}{1 - \rho \check{A}(z)}, \quad \rho < 1. \quad (1.15)$$

Пусть $\check{A}(z)$ – производящая функция распределения вероятностей на \mathbb{N} , а функция $P(z)$ определена равенством (1.15). В этом случае из (1.15) и того, что $\check{A}(0) = 0$, $\check{A}(1) = 1$ следует, что $P(0) = 1 - \rho$, $P(1) = 1$. Кроме того, из (1.15) для $z \in (0, 1)$ из того, что $\rho < 1$, $\check{A}(z) \leq 1$, вытекает $P(z) \geq 0$, а из (1.14) индукцией по $n \in \mathbb{N}$ следует, что для любого $n \in \mathbb{N}$ $P^{(n)}(z) \geq 0$. Итак, $P(z)$ абсолютно монотонна на $(0, 1)$ и $P(1) = 1$. Значит [3], $P(z)$ – производящая функция распределения вероятностей на \mathbb{Z}_+ . Таким образом, справедлива следующая

Основная теорема. Пусть $\check{A}(z)$ – производящая функция распределения вероятностей на \mathbb{N} , а функция $P(z)$ определена равенством (1.15). Тогда $P(z)$ – производящая функция распределения вероятностей на \mathbb{Z}_+ .

Обратное, вообще говоря, неверно, что показывает следующий пример. Из равенства (1.15) следует, что

$$\check{A}(z) = \frac{1}{\rho} \left[1 - \frac{1 - \rho}{P(z)} \right]. \quad (1.16)$$

Пусть стационарное распределение совпадает с распределением Пуассона:

$$p(k) = \frac{c^k}{k!} e^{-c}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

где $c = -\ln(1 - \rho)$. Тогда из (1.16), учитывая, что $P(z) = e^{c(z-1)} = (1 - \rho)e^{cz}$, получим

$$\check{A}(z) = \frac{1}{\rho} (1 - e^{-cz}).$$

Эта функция не может быть производящей функцией распределения вероятностей, так как, например, ее вторая производная отрицательна на $(0, 1)$. Таким образом, для установления необходимых условий квазиобратимости разумнее задавать производящую функцию размеров поступающих групп, а потом с помощью (1.15) находить производящую функцию стационарного

распределения. Задание последней функции и применение (1.16) не гарантирует, что получающаяся при этом функция будет производящей функцией некоторого распределения вероятностей.

2 Примеры применения основной теоремы

1. Если входящий поток ординарный, т. е.

$\check{A}(z) = z$, то (1.15) превращается в производящую функцию геометрического распределения:

$$p(n) = \rho^n(1 - \rho), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

2. Если размеры поступающих групп имеют геометрическое распределение с параметром a ($0 < a < 1$):

$$a(k) = a^{k-1}(1 - a), \quad k = 1, 2, \dots,$$

т. е.

$$\check{A}(z) = \frac{(1 - a)z}{1 - az},$$

то из (1.15)

$$P(z) = \frac{1 - \rho - az + \rho z}{1 - (a + \rho - \rho z)} = 1 - \rho + \rho \frac{[1 - (a + \rho - \rho z)]z}{1 - (a + \rho - \rho z)}. \quad (2.1)$$

Производящая функция смещенного геометрического распределения с параметрами (p_0, c) ($p_0, c \in (0, 1)$),

$p(0) = p_0$, $p(n) = (1 - p_0)(1 - c)c^{n-1}$, $n = 1, 2, \dots$, имеет форму

$$P(z) = p_0 + (1 - p_0) \frac{(1 - c)z}{1 - cz}.$$

Из (2.1) следует, что для квазиобратимости $n(t)$ необходимо, чтобы в стационарном режиме $n(t)$ имел смещенное геометрическое распределение с параметрами $(1 - \rho, a + \rho - \rho z)$. При этом в силу $0 < a < 1, 0 < \rho < 1$ оба параметра находятся в $(0, 1)$.

3. Пусть параметры поступающих групп имеют распределение Пуассона:

$$a(k) = \frac{a^{k-1}}{(k-1)!} e^{-a}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Тогда $\check{A}(z) = ze^{a(z-1)}$. Поэтому из (1.15)

$$P(z) = \frac{1 - \rho}{1 - \rho ze^{a(z-1)}} = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} (\rho z)^k e^{ka(z-1)} = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} (\rho e^{-a})^k e^{kaz} z^k = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} (\rho e^{-a})^k z^k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ka)^n}{n!} z^n.$$

Производя в последней сумме замену $k + n = m$, $k = l$, получим

$$P(z) = (1 - \rho) \sum_{m=0}^{\infty} z^m \sum_{l=0}^m \frac{(\rho e^{-a})^l (la)^{m-l}}{(m-l)!},$$

откуда

$$p(m) = (1 - \rho) \sum_{l=0}^m \frac{(\rho e^{-a})^l (la)^{m-l}}{(m-l)!}, \quad m = 0, 1, \dots \quad (2.2)$$

Назовем распределение на $\mathbb{Z}_{+, M}$, задаваемое вероятностями (2.2), M_1 -распределением с параметрами (ρ, a) .

4. Пусть размеры поступающих групп имеют дискретное равномерное распределение на $\{1, 2, \dots, M\}$:

$$a(k) = \frac{1}{M}, \quad k = 1, 2, \dots, M.$$

Тогда

$$\check{A}(z) = \frac{z(1 - z^M)}{M(1 - z)}$$

и по формуле (1.15)

$$P(z) = \frac{1 - \rho}{1 - \rho \frac{z(1 - z^M)}{M(1 - z)}} = \frac{(1 - \rho)(1 - z)}{1 - \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)z + \frac{\rho z^{M+1}}{M}} = (1 - \rho)(1 - z) \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left(1 + \frac{\rho}{M}\right)z - \frac{\rho}{M}z^{M+1} \right]^n = (1 - \rho)(1 - z) \times \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n C_n^k \left(-\frac{\rho}{M}z^{M+1}\right)^k \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{n-k} z^{n-k} = (1 - \rho)(1 - z) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n C_n^k \left(-\frac{\rho}{M}\right)^k \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{n-k} z^{kM+n}.$$

Производя замену $s = kM + n$, $t = k$, т. е. $n = s - tM$, $k = t$, и учитывая, что $n \geq 0, 0 \leq k \leq n$ тогда и только тогда, когда $s \geq t(M + 1) \geq 0$, получим

$$P(z) = (1 - \rho)(1 - z) \times \sum_{s=0}^{\infty} z^s \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor} C_{s-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-(M-1)t} = (1 - \rho) \left(\sum_{s=0}^{\infty} z^s \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor} C_{s-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-(M-1)t} - \sum_{s=1}^{\infty} z^s \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s-1}{M+1} \rfloor} C_{s-1-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-1-(M-1)t} \right) = (1 - \rho) \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} z^s \left(\sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor} C_{s-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-(M-1)t} - \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s-1}{M+1} \rfloor} C_{s-1-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-1-(M-1)t} \right) \right).$$

Отсюда

$$p(0) = 1 - \rho,$$

$$p(s) = \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor} C_{s-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-(M-1)t} - \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s-1}{M+1} \rfloor} C_{s-1-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-1-(M-1)t}, \quad s \geq 1. \quad (2.3)$$

Назовем распределение на \mathbb{Z}_+ , задаваемое (2.3), M_2 -распределением с параметрами (ρ, M) . Используя тождество $C_r^l - C_{r-1}^l = C_{r-1}^{l-1}$, заметим, что последняя вероятность может быть переписана как

$$p(s) = \sum_{t=0}^{\lfloor \frac{s-1}{M+1} \rfloor} \left(C_{s-1-tM}^{t-1} + \frac{\rho}{M} C_{s-tM}^t \right) \times \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-1-(M-1)t} + \sum_{t=\lfloor \frac{s-1}{M+1} \rfloor+1}^{\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor} C_{s-tM}^t \left(-\frac{\rho}{M}\right)^t \left(1 + \frac{\rho}{M}\right)^{s-(M-1)t}. \quad (2.4)$$

5. Пусть размеры поступающих групп имеют биномиальное распределение с параметрами (M, p) на множестве $\{1, 2, \dots, M+1\}$, т. е.

$$a(k) = C_M^{k-1} p^{k-1} q^{M-k+1},$$

$$k = 1, 2, \dots, M+1 \quad (n \in \mathbb{N}, 0 < p < 1, q = 1 - p).$$

Тогда

$$\tilde{A}(z) = z(pz + q)^M.$$

и по формуле (1.15)

$$P(z) = \frac{1 - \rho}{1 - \rho z(pz + q)^M} = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k z^k (pz + q)^{Mk} = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k z^k \sum_{l=0}^{Mk} C_{Mk}^l (pz)^l q^{Mk-l} = (1 - \rho) \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \sum_{l=0}^{Mk} C_{Mk}^l p^l z^{l+k} q^{Mk-l}.$$

Производя замену $s = k + l, t = k$, получим

$$P(z) = (1 - \rho) \sum_{s=0}^{\infty} z^s \sum_{t=\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor}^s \rho^t C_{Mt}^{s-t} p^{s-t} q^{(M+1)t-s}.$$

Следовательно,

$$p(s) = (1 - \rho) p^s q^{-s} \sum_{t=\lfloor \frac{s}{M+1} \rfloor}^s C_{Mt}^{s-t} \left(\frac{\rho}{p} q^{M+1}\right)^t, \quad (2.5) \\ s = 0, 1, \dots$$

Назовем распределение на \mathbb{Z}_+ , задаваемое (2.5), M_3 -распределением с параметрами (ρ, p, M) .

ЛИТЕРАТУРА

1. Miyazawa, M. Geometric Product-form Distribution for a Queueing Network with Non-standard Batch Arrivals and Batch Transfers / M. Miyazawa // Adv. Appl. Prob. – 1997. – Vol. 29, № 2. – P. 1–22.

2. Малинковский, Ю.В. Характеризация стационарного распределения сетей с групповыми перемещениями в форме произведения смещенных геометрических распределений / Ю.В. Малинковский, Е.В. Коробейникова // Автоматика и телемеханика. – 2010, № 12. – С. 43–56.

3. Феллер, В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения / В. Феллер. – Москва: Мир, 1964. – Т. 2. – 765 с.

Поступила в редакцию 10.10.2022.

Информация об авторах

Малинковский Юрий Владимирович – д.ф.-м.н., профессор

ВОЗМОЖНОСТИ И СРЕДСТВА БИБЛИОТЕКИ NEVOD ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ВРЕМЕННЫХ УКАЗАТЕЛЕЙ В ТЕКСТЕ

В.А. Савёнок¹, В.Б. Таранчук²

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск

²Белорусский государственный университет, Минск

FEATURES AND TOOLS OF THE NEVOD LIBRARY IN SOLVING PROBLEMS OF EXTRACTING TEMPORAL MARKERS IN THE TEXT

V.A. Savionok¹, V.B. Taranchuk²

¹Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk

²Belarusian State University, Minsk

Аннотация. Рассматриваются теоретические и методические вопросы семантического анализа текста в части извлечения фактов. На примере решения задачи извлечения временных указателей представлен способ поиска в тексте и его реализация в библиотеке Nevod. Анализируется функциональная полнота разработанной библиотеки путем сопоставления ее возможностей с инструментарием одного из лидеров в области распознавания сущностей – Microsoft.Recognizers.Text.

Ключевые слова: семантический анализ текста, автоматическая обработка текста, тестовые наборы данных, поиск текста по шаблонам, пакет шаблонов, распознавание сущностей, временные указатели, библиотека Nevod, система компьютерной алгебры Mathematica.

Для цитирования: Савёнок, В.А. Возможности и средства библиотеки Nevod при решении задач извлечения временных указателей в тексте / В.А. Савёнок, В.Б. Таранчук // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 84–92. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_84. – EDN: XJBRGC

Abstract. Theoretical and methodological issues of semantic text analysis in terms of extracting facts are considered. Using the example of solving the problem of extracting temporal markers, the text search method, and its implementation in the Nevod library are presented. The functional completeness of the developed library is analyzed by comparing its capabilities with the tools of one of the leaders in the field of entity recognition – Microsoft.Recognizers.Text.

Keywords: semantic text analysis, automatic text processing, test data sets, pattern-based text search, pattern package, entity recognition, temporal markers, Nevod library, Mathematica computer algebra system.

For citation: Savionok, V.A. Features and tools of the Nevod library in solving problems of extracting temporal markers in the text / V.A. Savionok, V.B. Taranchuk // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 4 (53). – P. 84–92. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_4_53_84 (in Russian). – EDN: XJBRGC

Введение

С развитием компьютерных технологий и постоянным приростом объемов текстовой информации исследования в области автоматической обработки текстов сфокусировались на прикладном аспекте вопроса. Возможности большинства инструментов ориентированы на морфологический и синтаксический анализ с применением методов теории вероятностей и прикладной статистики.

Одним из главных направлений в области обработки текстов является выделение их смысловой составляющей – семантический анализ. В этом направлении решаются такие задачи, как поиск документов в локальных и глобальных сетях [1], автоматическое аннотирование и реферирование [2], классификация и кластеризация документов [3], синтез текстов и машинный перевод [4], [5], извлечение фактов [6], анализ

тональности текста [7]. Результаты исследований применяются повсеместно, как в узкоспециализированных решениях и подсистемах, включаемых в экспертные системы [8], так и в масштабных системах поиска информации в глобальной сети. Можно констатировать, что, хотя научные и технические идеи в области обработки текстов развиваются интенсивно, некоторые задачи семантического анализа остаются нерешенными [9], [10].

Семантический анализ текста работает с представлением знаний в языковой форме. В основу компьютерной обработки ставится понимание, что слова в языке (тексте) отражают отдельные сущности, а грамматические отношения между словами передают их смысловую связь. Это обеспечивает преобразование текстового представления знаний в более формализованную форму – в виде специального словаря – онтологий. Словари такого типа должны оперировать

смыслами, не их частными обозначениями в виде слов, и, следовательно, описывать свойства и отношения понятий, а не слов [11], [12]. Процедуры семантического анализа опираются на функциональность используемого словаря. Эффективность словарной поддержки в системах семантического анализа является ключевым аспектом. При проектировании таких систем возникает вопрос, как правильно структурировать и представлять информацию в подобных словарях, чтобы поиск по ним был удобным и быстрым, к тому же, была возможность учитывать изменения в естественном языке – исчезновение старых и возникновение новых понятий, терминов, аббревиатур [13].

Онтологии применяются, в частности, на одном из ключевых этапов процесса семантического анализа – извлечении объектов и фактов. Данный этап позволяет установить взаимосвязи между участниками-фигурантами фактов для формирования целостной смысловой картины текста.

Наряду с онтологиями применяются и другие методы извлечения фактов: методы, основанные на машинном обучении, и методы, основанные на правилах [14]. Методы извлечения фактов на основе машинного обучения используют автоматическое извлечение признаков из текста и применяют такие алгоритмы машинного обучения, как, например, классический байесовский классификатор, дерево решений, или метод опорных векторов [15]. Методы, основанные на правилах, часто применяются для установления взаимосвязей между объектами – семантических отношений, которые носят различный характер: иерархия, агрегация, функциональные, семиотические отношения, отношения тождества, корреляции. Выделение отношений в рамках каждой из перечисленных групп требует составления соответствующих наборов предикатов различной формы [16].

Неотъемлемой составляющей задачи извлечения фактов и определения отношений между объектами является локализация во времени события, соответствующего факту. Информация, позволяющая локализовать событие на временной оси, передается посредством разнообразных по форме и содержанию текстовых выражений – временных указателей. Конечным результатом извлечения временных указателей из текста является их представление и интерпретация в рамках заданной в процессе семантического анализа формальной модели [17].

Одним из первых этапов извлечения фактов является выделение фрагментов текста, представляющих собой языковое отражение искомого факта, что обуславливает необходимость решения задачи поиска в тексте конкретных задаваемых конструкций из слов и словосочетаний. Для этого применяется ряд методов и инструментов,

в том числе средств лексического анализа, полнотекстового и морфологического поиска, которые оперируют на уровне символов и слов, а также содержат средства учета морфологии, словоформ [18]. В попытке воспользоваться некоторой формализованностью, присущей естественно-языковым конструкциям, указанные средства нередко основываются на грамматиках. Согласно иерархии Хомского, используют грамматики регулярного уровня и контекстно-свободные грамматики [19]. Примером средства извлечения сущностей, основанного на регулярных грамматиках, является [20]. Учет морфологических характеристик осуществляется в таких средствах, как [21] и [22]. Как показывают исследования, использование регулярных и контекстно-свободных грамматик при работе с естественными языками не позволяет охватить все многообразие языковых конструкций [23]. Поддержка морфологических аспектов для нескольких языков, наряду с работой на низком уровне символов, усложняет процесс описания языковых конструкций для поиска фрагментов текста, что в целом понижает производительность обработки текстов на естественных языках.

Резюмируя упомянутые аспекты текущего состояния в частях теории и методов, отметим, что создание новых методов семантического анализа текстов откроет новые возможности и позволит существенно продвинуться в решении многих задач компьютерной лингвистики, в частности, таких как машинный перевод, автореферирование, классификация текстов и других. Важной частью при этом является разработка новых инструментов, позволяющих автоматизировать семантический анализ. Представляется целесообразным разработать и реализовать средства текстового поиска, оперирующие на уровне слов и их сочетаний с минимальным учетом морфологических свойств. Ориентируясь на большие объемы данных, следует также оптимизировать способ работы с текстом, например, путем реализации потоковой обработки за один последовательный просмотр текста. Такой метод текстового поиска разработан в [24] и реализован в библиотеке Nevod [25]. Для оценки качества новых инструментов, предназначенных для извлечения фактов, и подтверждения их функциональной полноты обязательным является тестирование на эталонных наборах. Такие наборы следует готовить на базе типовых, но с дополнениями, отвечающими добавляемой функциональности. Первостепенной задачей при формировании эталонных наборов является определение их содержания, включения текстовых фрагментов, подтверждающих достоверность получаемых результатов извлечения фактов.

Анализ предложений и ИТ решений показывает наличие достаточно большого спектра систем, программных пакетов и приложений

семантического анализа текстов на английском, французском, немецком, испанском, итальянском, китайском и некоторых других языках. В то же время, можно констатировать, что у лидеров мирового уровня отсутствуют тестовые наборы для анализа текстов, в частности, на русском, белорусском языках [20], [26], [27]. Поэтому описываемые в данной работе методические рекомендации по подготовке наборов данных составлены без привязки к обрабатываемому языку и имеют общий характер.

Целью настоящей публикации является изложение:

- методических основ, особенностей использования разработанной библиотеки Nevod;
- вариантов настройки, возможного расширения библиотеки Nevod по результатам эксплуатации и сопоставления с аналогами, обоснование ее функциональной полноты с использованием специально сформированных наборов;
- подходов, методических и алгоритмических решений, средств подготовки представительных наборов данных для тестирования программных инструментов семантического анализа применительно к задачам извлечения фрагментов текста с временными указателями.

1 Общие сведения о библиотеке Nevod

Библиотека Nevod предназначена для поиска параметризованных шаблонов в тексте, которые представляют собой наборы правил с описаниями лексем, их сочетаний в виде последовательностей, альтернатив (вариаций), повторений и контекстных конструкций. Запатентованная технология позволяет проводить семантический анализ текста путем организации поиска сущностей и взаимосвязей между ними при использовании соответствующих наборов шаблонов [24].

Состав библиотеки Nevod. Библиотека включает компоненты поиска и редактор набора шаблонов, составные части показаны на рисунке 1.1.

Компоненты поиска обеспечивают ключевую функциональность библиотеки, к ним относятся:

– *Синтаксический анализатор языка описания шаблонов* – строит на основании текста описания шаблонов соответствующее дерево выражений и запрашивает загрузку требуемых наборов шаблонов.

– *Загрузчик набора шаблонов* – отвечает за поиск и загрузку текста описания наборов шаблонов, указанных в качестве зависимостей для пользовательского набора.

– *Компонент связывания наборов шаблонов* – устанавливает гиперсвязи между деревьями выражений, которые соответствуют наборам шаблонов, и проверяет доступность используемых ссылок.

– *Лексический анализатор текста для поиска* – осуществляет разбиение входного текста на последовательность лексем для анализа.

– *Движок поиска* – производит сопоставление последовательности лексем исходного текста для поиска со связанными деревьями выражений искомого шаблонов. Предварительно на основании деревьев выражений шаблонов составляется *поисковый индекс*, который используется при работе *автомата поиска*.

Редактор набора шаблонов реализован в виде универсального языкового сервера, поддерживающего разработанный Microsoft протокол LSP (Language Server Protocol) [28]. Использование данного протокола позволяет встраивать модуль в большинство современных сред разработки с минимальными затратами путем написания соответствующих расширений для взаимодействия с языковым сервером, например [29].

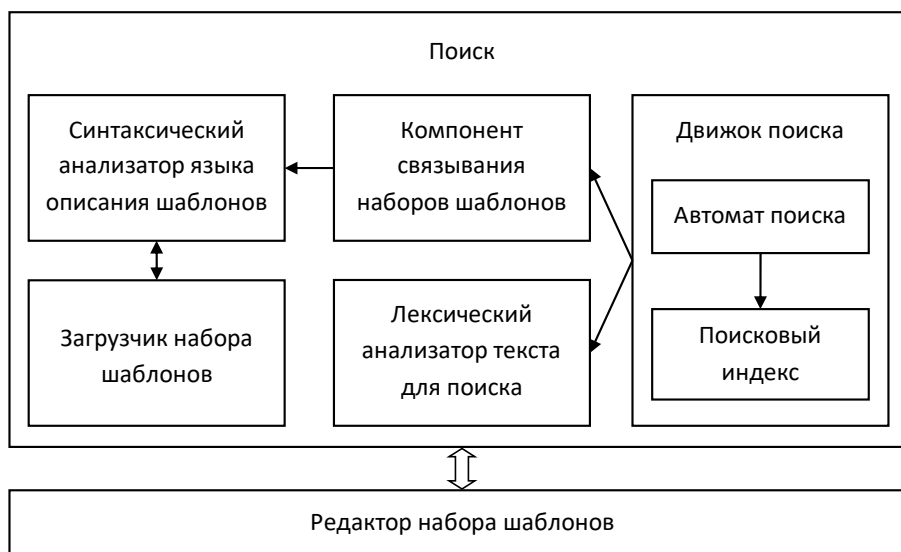


Рисунок 1.1 – Библиотека Nevod

При редактировании обеспечивается составление связанных наборов шаблонов с использованием базовых, контекстных и специальных операторов. К базовым операторам относятся следующие:

- последовательность – строгое следование подряд заданных выражений;
- вариация – возможность совпадения заданных выражений и невозможность совпадения других указанных выражений;
- повторение – последовательное совпадение выражения несколько раз подряд;
- опциональность – необязательное совпадение выражения;
- последовательность слов – совпадение двух выражений, разделенных лексемами «разрыв слова»;
- промежуток в словах – последовательное совпадение двух выражений, разделенных заданным количеством слов;
- сочетание – совпадение двух выражений в любом порядке, разделенных любым количеством лексем.

Контекстные операторы представлены следующими конструкциями:

- находится внутри – совпадение одного выражения в любой позиции по тексту совпадения другого выражения;
- не пересекает – совпадение выражения, которое не пересекает совпадения другого заданного выражения;
- содержит – совпадение выражения, текст которого содержит совпадения другого заданного выражения в любой позиции.

Оператор извлечения части совпадения является единственным представителем специальных операторов; он позволяет выделить в дополнительный атрибут результата часть текста совпадения, которая соответствует обозначенной части выражения.

Помимо операторов, в синтаксисе языка описания шаблонов определены специальные директивы, управляющие связыванием и компиляцией шаблонов (построением поискового индекса):

- @require – установление гиперсвязи с внешним набором шаблонов (связывание);
- @namespace – объявление пространства имён шаблонов (связывание);
- @pattern – обозначение определения шаблона, по умолчанию не является целью поиска (связывание и компиляция);
- @search – обозначение цели поиска в наборе шаблонов (компиляция);
- @where – определение секции вложенных шаблонов (связывание и компиляция).

В комплект библиотеки Nevod включены базовые (по умолчанию) наборы (комплекты) шаблонов, которые разработаны для поиска различных сущностей в тексте, таких как даты и время, временные интервалы, электронные адреса,

телефонные номера, мировые денежные валюты и др. [30]. В данной работе сделан акцент на наборе шаблонов для поиска и распознавания в тексте абсолютных и относительных дат, которые могут выступать в качестве временных указателей.

2 О функциональной полноте библиотеки Nevod

Извлечение временных указателей средствами библиотеки Nevod предполагает проведение сопоставления возможностей с аналогичной библиотекой для распознавания сущностей в тексте Microsoft.Recognizers.Text (далее MRT) [20]. Библиотека MRT предоставляет возможность распознавания сущностей в текстах различных языков и широко используется в продуктах Microsoft, например, в предустановленных шаблонах для сервиса интеллектуального понимания языка LUIS (Language Understanding Intelligent Service), в платформе для создания диалоговых ботов Power Virtual Agents [31] и в когнитивных языковых сервисах в облачной инфраструктуре Azure – NER (Named Entity Recognition). Библиотека распространяется под лицензией открытого и свободного программного обеспечения MIT; наряду с исходным кодом в репозитории Microsoft на GitHub [20] публично доступны контрольные наборы данных для различных языков. Отметим, что в MRT отсутствует поддержка русского и белорусского языка.

Для поиска временных меток в тексте в MRT применяется модуль Microsoft.Recognizers.Text.DateTime, в частности, его компонент BaseDateExtractor. Данному компоненту соответствует контрольный набор, представленный в формате JSON, – файл DateExtractor.json [32]. Набор содержит 143 элемента, включающих абсолютные и относительные даты в различных вариантах записи, а также метаинформацию, которая используется для проверки корректности результатов извлечения. К элементу набора может быть прикреплен поисковый контекст – опорная дата, которая указывает точку во времени, используемую для перевода относительных временных меток в абсолютные. Пример элемента контрольного набора с комментариями по структуре изображен на рисунке 2.1.

Контрольный набор DateExtractor используется для подтверждения функциональной полноты библиотеки Nevod. Для сопоставления возможностей библиотек MRT и Nevod разработаны два программных модуля – mMRT и mNevod, обеспечивающие поиск и извлечение временных меток из текста. С использованием средств системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica проведено сравнительное тестирование программных модулей на упомянутом контрольном наборе. Получены следующие результаты: mMRT обработал корректно все элементы набора,

```

{
  "Input": "Cortana, please set up a Skype call sometime this friday
june twenty three with Jim", // входной текст для поиска
  // поисковый контекст:
  "Context": {"ReferenceDateTime": "2018-06-20T00:00:00"},
  "Results": [ // перечисление ожидаемых результатов
    // содержит текст совпадения, тип, позицию начала и длину совпадения
    {"Text": "this friday", "Type": "date", "Start": 45, "Length": 11},
    {"Text": "june twenty three", "Type": "date", "Start": 57, "Length": 17}
  ]
}

```

Рисунок 2.1 – Пример элемента контрольного набора

показав точность 100%; mNevod с базовым набором шаблонов [30] произвел корректное извлечение временных меток в 82,5% случаев.

Полученные результаты предполагают анализ содержимого контрольного набора. Для реализации такого анализа использовались средства системы Mathematica. Определены 17,5% нераспознанных mNevod ситуаций, они разделены на три категории:

1. Месяц и порядковый день месяца в словесной форме – «a baseball on may the eleventh», «i'll go back fourth of may» и т. п.
2. День недели в будущем относительно текущей даты – «Are you available two monday later?» и т. п.
3. Порядковый день недели в месяце – «i'll go back second sunday» и т. п.

Благодаря поддержке расширяемости набора правил в библиотеке Nevod, в базовый набор правил включены дополнительные шаблоны, которые позволили корректно обработать ранее не распознанные ситуации.

Для распознавания ситуаций категории 1 разработан дополнительный шаблон MonthWithOrdinalDay, который можно описать в виде нескольких альтернативных цепочек:

- а) опциональный день недели, название месяца и номер дня (числовой или словесный), опциональный год;
- б) опциональный день недели, номер дня (числовой или словесный) и название месяца, опциональный год;
- в) номер дня (числовой или словесный) и относительный месяц («предыдущий», «следующий», «текущий» и т. п.).

С целью сокращения длины шаблона и снижения дублирования, из альтернатив а) и б) вынесен общий префикс (опциональный день недели) и суффикс (опциональный год), что позволило объединить обе ветки в цепочку с вариацией на второй позиции. Также при написании шаблона использовались уже содержащиеся в базовом наборе шаблонов элементы «день недели», «год», «относительный месяц» и др., что позволило сократить время составления нового правила и сохранить достаточный уровень наглядности полученного шаблона.

После добавления нового элемента в базовый набор шаблонов библиотеки Nevod, точность решения на его основе для контрольного набора MRT повысилась на 12,1% – до 94,4%.

Для обеспечения распознавания ситуаций категории 2 составлен шаблон OrdinalWeekDay, представляющий из себя простую цепочку из порядкового номера дня недели в месяце в словесной форме (от одного до пяти: «first», «second», ... «fifth») и названия дня недели. Для учета различных вариантов сокращенного написания дня недели использован готовый шаблон из базового набора в библиотеке Nevod. Добавление нового шаблона повысило корректность работы модуля mNevod на 2,8% по сравнению с предыдущим результатом – до 97,2%.

Ситуации категории 3 устранены шаблоном RelativeWeekDay, который также представлен цепочкой из словесной записи числа, задающего количество пропускаемых недель, и названия дня недели, а также суффикса (вариации «from now» или «later»), указывающего на относительность временной метки. Данный шаблон обеспечивает распознавание еще 1,4%, повысив общий результат до 98,6% правильно распознанных ситуаций из контрольного набора MRT.

При помощи средств Mathematica проведен анализ итоговых результатов. Обнаружено, что 1,4% ситуаций, которые не были распознаны после расширения базового набора правил библиотеки Nevod, представлен следующими элементами:

- 1) «Cortana, please set up a Skype call sometime this friday june twenty two with Jim»;
- 2) «6,107.31 August 2019 should not include the decimal».

В первом случае при использовании mNevod распознаны две временные метки: «this friday» и «june twenty two», в то время как в контрольном наборе MRT определено, что извлеченные выражения необходимо объединить. Библиотека MRT объединяет несколько идущих подряд текстовых дат в один результат извлечения на основании контекста – опорной даты для разрешения относительных временных меток. Программный модуль на основе библиотеки Nevod не производит объединения результатов извлечения, однако описанную ситуацию можно

предусмотреть путем добавления отдельного этапа условного слияния последовательно извлеченных временных меток. Следует отметить, что в некоторых случаях, например, при отсутствии какой-либо информации об опорной дате, объединенное выражение может представлять собой некорректную дату. Описанная ситуация учтена в контрольном наборе MRT и представлена другим элементом с такой же опорной датой: «Cortana, please set up a Skype call sometime this friday june twenty three with Jim». Здесь и mNevod, и mMRT извлекли две временные метки: «this friday» и «june twenty three».

Во втором случае при детальном рассмотрении тестового набора MRT выяснилось, что из фрагмента «6,107.31 August 2019» предполагается извлечение подстроки «August 2019», т. е. символ точка считается десятичным разделителем. Результирующая строка относится к *временным интервалам*, за обработку которых в библиотеке MRT отвечает отдельный модуль. Таким образом, при извлечении *временных меток* ожидается пустой результат. В базовом наборе правил библиотеки Nevod символ точка определен в качестве признака конца предложения, а десятичным разделителем выступает символ запятой. Данная формулировка привела к получению результата «31 August 2019». Путем точечного изменения существующих правил извлечения числовых дат достигнут ожидаемый результат – извлечен временной интервал «August 2019».

Заметим, что шаблоны, составленные для каждой категории ситуаций, первоначально не распознанных mNevod, являются независимыми: добавление или изъятие одного из шаблонов не влияет на работу других. Так, например, при изъятии из итогового набора правил шаблона, соответствующего ситуациям категории 1, и сохранении шаблонов для ситуаций категорий 2 и 3, точность работы модуля снизилась на 12,1% – на столько же процентов она повысилась при добавлении шаблона в исходный базовый набор правил. Написание независимых правил позволяет составлять наборы шаблонов, обладающие свойством аддитивности, что упрощает процесс их корректировки и совместного использования.

Таким образом, путем сравнительного анализа результатов обработки типового контрольного набора из библиотеки MRT подтверждена функциональная полнота библиотеки Nevod. В ходе проверки показаны дополнительные возможности библиотеки, в частности расширяемость набора правил.

Расширяемость набора шаблонов в библиотеке Nevod позволяет настраивать основанные на ней решения во время эксплуатации без необходимости взаимодействия с разработчиками библиотеки, что обеспечивает независимость решений и сокращает цикл обновления набора правил.

3 Методика формирования представительного тестового набора

При проверке и настройке средств извлечения фактов, в частности, временных указателей, одной из позиций для оценивания является ориентированность на распознавание, а не однозначную идентификацию сущностей в тексте. Исходный контрольный набор DateExtractor библиотеки MRT не позволяет в полной мере проанализировать функциональность соответствующих средств такого типа – он охватывает большинство вариантов написания дат в английском языке, включает аббревиатуры и общепринятые сокращения, но не учитывает возможность искажения входного текста. Представляется целесообразным составить новый контрольный набор данных, который бы учитывал данный аспект при оценке инструментов извлечения фактов.

Ориентируясь на инструменты для извлечения временных интервалов в тексте, используя фрагменты из DateExtractor, подготовлен новый тестовый набор. Для корректного сравнения (и с MRT в дальнейшем) из DateExtractor исключены элементы, составляющие упомянутые выше 1,4% нераспознанных библиотекой Nevod ситуаций. В полученный набор из 141 элемента внесены искажения (ошибки), наиболее типичные для ручного набора текста, таким образом, чтобы они затрагивали фрагменты текста, представляющие собой цель для извлечения.

В качестве типичных ошибок ручного ввода, которые не затрагивают итоговую длину слова, выбраны следующие виды ситуаций:

- 1) замена одиночной буквы,
- 2) перестановка пары соседних букв в слове.

Следует отметить, что при моделировании искажений вида 1) существует естественная эвристика, позволяющая ограничить множество букв, которые могут быть употреблены некорректно вместо заданной корректной буквы. В основе лежит предположение об использовании стандартного средства ввода текстовых данных для ЭВМ – клавиатуры. В таком случае наиболее часто встречающимися заменами будут являться соседние буквы по расположению клавиш на клавиатуре. Например, для слова «Monday» одним из частых вариантов такой ошибки для раскладки QWERTY является замена буквы «d» на букву «s» – «Monsay».

При моделировании ошибок вида 2) также возможно применение подобной естественной эвристики. Принимая во внимание слепой метод печати [33], логично предположить, что чаще всего ошибка с перестановкой будет возникать для символов, за набор которых отвечают пальцы разных рук. Схема зон ответственности разных пальцев при слепом методе печати изображена на рисунке 3.1. К примеру, для слова «Sunday» вариантом такого искажения в

раскладке QWERTY является перестановка букв «a» и «u» – «Sundyа».



Рисунок 3.1 – Схема зон ответственности разных пальцев при слепом методе печати для американской раскладки QWERTY

Перечисленные виды искажений входного текста могут носить множественный характер: в одном слове может присутствовать как несколько ошибок одного вида, так и одновременно ошибки нескольких видов. При составлении контрольных наборов необходимо учитывать различные вариации ошибок. Далее показан процесс моделирования каждого вида искажений отдельно, без учета их комбинаций.

В соответствии с каждым видом ошибок, в полученный набор из 141 элемента внесены следующие искажения:

- произведена замена буквы «d» на буквы «s» в слове «monday» (соответствует 2,8% набора, всего слово содержится в 3,5% набора);

- произведена перестановка букв «a» и «u» в слове «sunday» (соответствует 5,7% набора, всего слово содержится в 7% набора).

При оценке корректности обработки полученного набора программными модулями mNevod и mMRT, получены идентичные результаты: 91,4%. Благодаря расширяемости шаблонов в пакете Nevod добавлены правила для нивелирования соответствующих ошибочных ситуаций. Для распознавания замены буквы внесены различные варианты искажения слова «monday» на позиции, соответствующей букве «d». Для учета перестановки соседних букв в слове «sunday» добавлено правило, покрывающее возможные перестановки: с учетом описанной ранее эвристики, это варианты «sundyа» и «usnday». Программный модуль, использующий библиотеку Nevod с обновленным набором правил, обработал корректно 100% представительного набора.

Таким образом, использование средств библиотеки Nevod позволяет адаптировать программный модуль под различные варианты искажений входных данных путем внесения точечных (локальных) изменений в существующие наборы шаблонов. Применение предложенных эвристик при составлении новых наборов правил позволит реализовать первоначальную обработку типовых ошибок ввода.

4 Используемые средства Wolfram Mathematica

Для сопоставления функциональных возможностей модулей mNevod и mMRT при решении

задачи выделения временных указателей в тексте не только на основе контрольного набора DateExtractor, но и формирования других представительных наборов, в Wolfram Mathematica разработано сервисное приложение mDataWM. В нем реализованы программные инструменты, которые позволяют выделить подлежащий обработке набор данных от метаинформации, оценить и сопоставить качество результатов обработки модифицированного набора модулями mMRT и mNevod, а также исказить любой набор данных и проверить работоспособность библиотек. Приложение mDataWM обеспечивает создание тестовых наборов на любых языках и анализ результатов их обработки. Средства приложения mDataWM включают инструменты:

- искажения начального и формирование модифицированного набора данных;
- импорта / экспорта для обеспечения взаимодействия Mathematica с модулями mMRT и mNevod (работа с файлами и отделение данных от метаинформации);
- оценки качества результатов обработки тестового набора.

В приложении mDataWM использованы следующие функции ядра системы Mathematica [34]:

- Import[source],
- Export["dest.ext",expr,"format"],
- Map[f,expr],
- MapIndexed[f,expr],
- Association[key1→val1,key2→val2,...],
- AssociateTo[a, key→val],
- SortBy[list,f],
- KeyMemberQ[assoc,form],
- KeyDrop[assoc,{key1, key2,...}],
- KeyTake[assoc,{key1,key2,...}],
- RandomSample[{e1,e2,...},n],
- Select[list, crit],
- Delete[expr,n],
- StringReplace["string",s→sp],
- Count[list,pattern].

Заключение

Отмечены требования к новым средствам семантического анализа применительно к задаче извлечения временных указателей в тексте; представлены способы и инструменты поиска в тексте, их реализация в библиотеке Nevod. При подтверждении функциональной полноты библиотеки показано основное преимущество – расширяемость набора правил. Предложены несколько естественных эвристик, которые позволяют оптимизировать процесс внесения искажений в представительный набор для тестирования, анализа результатов извлечения фактов. Соответствующие инструменты подготовки специальных наборов данных для тестов разработаны с использованием средств системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica. Приведено описание методов и средств создания подобных

наборов, поясняется их содержание и особенности наполнения, когда наряду со значимыми и ключевыми словами, аббревиатурами, фразами включаются их искажения. Показано, что средствами библиотеки Nevod обеспечено распознавание, а не только однозначная идентификация сущностей в тексте.

ЛИТЕРАТУРА

1. Половикова, О.Н. Анализ способов формализаций документов для выполнения семантического поиска / О.Н. Половикова // Известия Алтайского государственного университета. – 2012. – № 1–2 (73). – С. 101–103.

2. Батура, Т.В. Методы и системы автоматического реферирования текстов: монография / Т.В. Батура, А.М. Бакиева; Ин-т систем информатики им. А.П. Ершова СО РАН. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. – 110 с.

3. Барахнин, В.Б. Кластеризация текстовых документов на основе составных ключевых термов / В.Б. Барахнин, Д.А. Ткачев // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. – 2010. – Т. 8. – № 2. – С. 5–14.

4. Липницкий, С.Ф. Математическая модель синтеза текстов на основе слияния коммуникативных фрагментов / С.Ф. Липницкий // Проблемы физики, математики и техники. – 2018. – № 4 (37). – С. 106–110.

5. Митренина, О.В. Машинный перевод / О.В. Митренина // Прикладная и компьютерная лингвистика / И.С. Николаев, О.В. Митренина; под ред. Т.М. Ландо – М.: URSS, 2017. – Ч.2 – Гл. 1 – С. 156–189.

6. Богатырев, М.Ю. Извлечение фактов из текстов естественного языка с применением концептуальных графовых моделей / М.Ю. Богатырев // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. – 2016. – № 7–1. – С. 198–208.

7. Семина, Т.А. Анализ тональности текста: современные подходы и существующие проблемы / Т.А. Семина // Социальные и гуманитарные науки. Отечественная и зарубежная литература. Серия 6: Языкознание. Реферативный журнал. – 2020. – № 4. – С. 47–63.

8. Джарратано, Дж. Экспертные системы. Принципы разработки и программирование / Дж. Джарратано, Г. Райли. – 4-е изд. – М.: Вильямс, 2007. – 1152 с.

9. Сачков, В.Е. Анализ проблемы частотного перекрытия слов при определении тематики текста в семантических вычислительных комплексах / В.Е. Сачков // Вестник современных исследований. – 2018. – № 6.1 (21). – С. 486–488.

10. Листратова, О.К. К проблеме анализа единиц решения при восприятии формы слова и его семантической интерпретации / О.К. Листратова // Вопросы современной филологии

в контексте взаимодействия языков и культур: Материалы IV Международной научно-практической конференции, Оренбург, 26–27 мая 2021 года / Отв. за выпуск Е.А. Стуколова. – Оренбург: Оренбургский государственный педагогический университет, 2021. – С. 91–95.

11. Система и способ создания и использования пользовательских семантических словарей для обработки пользовательского текста на естественном языке: пат. 2 584 457 Российская Федерация, МПК G06F 17/28 / Е.Н. Яковлев, А.С. Старостин; заявитель общество с ограниченной ответственностью «Аби ИнфоПоиск» – № 2015103467/08; заявл. 03.02.15; опубл. 20.05.16 // Официальный бюл. / Федеральная служба по интеллектуальной собственности. – 2016. – № 14.

12. Рубашкин, В.Ш. Семантический (концептуальный) словарь для информационных технологий: методы формирования и ведения словаря / В.Ш. Рубашкин, Д.Г. Лахути // Научно-техническая информация. Серия 2: Информационные процессы и системы. – 2000. – № 7. – С. 1–9.

13. Батура, Т.В. Семантический анализ и способы представления смысла текста в компьютерной лингвистике / Т.В. Батура // Программные продукты и системы. – 2016. – № 4. – С. 45–57. – DOI: 10.15827/2311-6749.21.220.

14. Горкун, О.П. Подходы к извлечению объектов и фактов из неструктурированных текстов / О.П. Горкун // Advanced science: сборник статей VI Международной научно-практической конференции, Пенза, 12 января 2019 года. – Пенза: «Наука и Просвещение» (ИП Гуляев Г.Ю.), 2019. – С. 70–72.

15. Семантический анализ для автоматической обработки естественного языка [Электронный ресурс] / Научно-технический центр ФГУП «ГРЧЦ» (НТЦ), 2021. – Режим доступа: https://rdc.grfc.ru/2021/09/semantic_analysis/. – Дата доступа: 20.04.2022.

16. Найханова, Л.В. Основные типы семантических отношений между терминами предметной области / Л.В. Найханова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Технические науки. – 2008. – № 1 (5). – С. 62–71.

17. Сулейманова, Е.А. Семантический анализ контекстных дат / Е.А. Сулейманова // Программные системы: теория и приложения. – 2015. – Т. 6. – № 4 (27). – С. 367–399.

18. Бутов, А.Л. Метод и алгоритмы извлечения фактов в информационно-аналитических системах / А.Л. Бутов, А.Т. Миргалеев // Инновации в информационно-аналитических системах: сб. научн. трудов. – Курск: Науком 2013. – № 2. – С. 36–52.

19. Гаршина, В.В. Разработка контекстно свободных грамматик с использованием Томтапарсера для задач извлечения фактов из неструктурированных текстов / В.В. Гаршина, В.Е. Панин,

И.В. Коротких // Информатика: проблемы, методология, технологии: Сборник материалов XIX международной научно-методической конференции, Воронеж, 14–15 февраля 2019 года; под ред. Д.Н. Борисова. – Воронеж: Издательство «Научно-исследовательские публикации» (ООО «Вэлборн»), 2019. – С. 1447–1452.

20. *Microsoft.Recognizers.Text provides recognition and resolution of numbers, units, and date / time expressed in multiple languages* [Electronic resource]. – 2022. – Mode of access: <https://github.com/microsoft/Recognizers-Text>. – Date of access: 15.04.2022.

21. *Томита-парсер – Технологии Яндекса* [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://yandex.ru/dev/tomita>. – Дата доступа: 15.04.2022.

22. *RCO Fact Extractor SDK | RCO* [Электронный ресурс]. – 2022. – Режим доступа: http://www.rco.ru/?page_id=3554. – Дата доступа: 15.04.2022.

23. *Shieber, S.M. Evidence against the context-freeness of natural language / S.M. Shieber // Studies in Linguistics and Philosophy. – 1985. – Vol. 8, № 3. – P. 333–343.*

24. *Способ поиска в тексте совпадений с шаблонами*: пат. 037156 Респ. Беларусь, МПК G06F 17/27, G06F 17/24 / Д.А. Сурков, К.А. Сурков, Ю.М. Четырько, И.В. Шимко, В.А. Савёнок; заявитель общество с ограниченной ответственностью «Незабудка Софт» – № 201800581; заявл. 24.09.18; опубл. 31.03.20 // Официальный бюл. / Евразийская патентная организация. – 2021. – № 2.

25. *Nevod is a language and technology for pattern-based text search* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://github.com/nezaboodka/nevod>. – Date of access: 15.04.2022.

26. *Solves basic Russian NLP tasks, API for lower level Natasha projects* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://github.com/natasha/natasha>. – Date of access: 16.04.2022.

27. *Stanford CoreNLP: A Java suite of core NLP tools* [Electronic resource]. – 2022. – Mode of access: <https://github.com/stanfordnlp/CoreNLP>. – Date of access: 16.04.2022.

28. *Official page for Language Server Protocol* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://microsoft.github.io/language-server-protocol>. – Date of access: 23.04.2022.

29. *Nevod language extension for VS Code* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://github.com/nezaboodka/nevod-vscode>. – Date of access: 23.04.2022.

30. *Nevod Basic Patterns* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://github.com/nezaboodka/nevod-patterns>. – Date of access: 23.04.2022.

31. *Intelligent Virtual Agents and Bots | Microsoft Power Virtual Agents* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://powervirtualagents.microsoft.com/en-us/>. – Date of access: 15.04.2022.

32. *Recognizers Test Cases Specs for Date Extractor* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://github.com/microsoft/Recognizers-Text/blob/master/Specs/DateTime/English/DateExtractor.json>. – Date of access: 18.04.2022.

33. *Селезнева, Ю.А. Набор текста на ПК: Слепой десятипальцевый метод печати / Ю.А. Селезнева – СПб.: «Корона Принт», 2005. – 64 с.*

34. *Wolfram Language & System Documentation Center* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://reference.wolfram.com/language/>. – Date of access: 25.04.2022.

Поступила в редакцию 23.06.2022.

Информация об авторах

Таранчук Валерий Борисович – д.ф.-м.н., профессор
Савёнок Владислав Александрович – магистр технических наук

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Статья, направляемая в редакцию журнала «Проблемы физики, математики и техники», должна:

- соответствовать профилю журнала;
- являться оригинальным произведением, которое не предоставлялось на рассмотрение и не публиковалось ранее в объеме более 25% в других печатных и (или) электронных изданиях, кроме публикации препринта (рукописи) статьи авторов (соавторов) на собственном сайте;
- содержать все предусмотренные действующим законодательством ссылки на цитируемых авторов и источники опубликования заимствованных материалов, автором (соавторами) должны быть получены все необходимые разрешения на использование в статье материалов, правообладателем (лями) которых автор (соавторы) не является (ются).

Статья не должна содержать материалы, не подлежащие опубликованию в открытой печати, в соответствии с действующими законодательными актами Республики Беларусь.

Статья представляется на русском, белорусском или английском языках в двух экземплярах на белой бумаге формата А4 с пронумерованными страницами. Одновременно в редакцию направляется электронный вариант статьи на CD, или по электронной почте (e-mail: pfmt@gsu.by).

Для подготовки статьи можно использовать редактор MS Word for Windows (2000/2003), шрифт – Times New Roman, 14 pt, все поля – 2 см, или систему LaTeX с опцией 12 pt в стандартном стиле article без переопределения стандартных стилей LaTeX'a и введения собственных команд (все поля – 2 см).

В левом верхнем углу первой страницы статьи ставится индекс УДК, ниже по центру на русском и английском языках: название статьи прописными буквами, инициалы и фамилия автора (авторов), название организации, в которой он (они) работает, аннотация (до 10 строк) и перечень ключевых слов.

Статья, как правило, должна содержать: введение, основную часть, заключение и литературу.

Название статьи должно отражать основную идею исследования, быть кратким.

Во введении дается краткий обзор литературы, обосновывается цель работы и, если необходимо, отражается связь с научными и практическими направлениями. Обязательными являются ссылки на работы других авторов, публикации последних лет в области исследования, включая зарубежные.

Основная часть должна содержать описание методики, объектов исследования с точки зрения их научной новизны. Она может делиться на подразделы (с разъясняющими заголовками) и содержать анализ публикаций, относящихся к содержанию данных подразделов.

Формулы, рисунки, таблицы нумеруются в пределах раздела, например: (1.1), (2.3), рисунок 1.1, таблица 2.1. Нумерации подлежат только те формулы, на которые имеются ссылки. Номер формулы прижимается к правому краю страницы, а сама формула центрируется. Рисунки и таблицы располагаются непосредственно в тексте. Размер рисунков и графиков не должен превышать 10×15 см. Полутоновые фотографии должны иметь контрастное изображение. Повторение одних и тех же данных в таблицах и рисунках не допускается.

Каждая таблица должна иметь заголовок, в ней обязательно указываются единицы измерения рассматриваемых величин. Размерность всех величин должна соответствовать Международной системе единиц измерений (СИ). Не допускается сокращение слов, кроме общепринятых (т. е., и т. д., и т. п.).

В заключении в сжатом виде формулируются полученные результаты, их новизна, преимущества и возможности практического использования.

Список литературы должен содержать полные библиографические данные. Он составляется в порядке упоминания ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы не допускаются. Ссылки даются в оригинальной транслитерации. Порядковые номера ссылок по тексту указываются в квадратных скобках (например, [1], [2]).

Статья подписывается всеми авторами. К статье прилагаются:

- сопроводительное письмо организации, в которой выполнена работа с просьбой об опубликовании;
- сведения об авторах;
- экспертное заключение о возможности опубликования статьи в открытой печати;
- договор о передаче авторского права (в двух экземплярах).

Сведения об авторах представляются на отдельной странице и содержат: фамилию, имя, отчество автора (авторов), ученую степень, звание, место работы и занимаемую должность, специалистом в какой области является автор, почтовый индекс и точный адрес для переписки, телефоны (служебный или домашний), адрес электронной почты. Следует указать автора, с которым нужно вести переписку и направление, к которому относится представленная работа (физика, математика, техника).

Поступившая в редакцию статья направляется на рецензирование. В случае её отклонения редакция сообщает автору решение редколлегии и заключение рецензента, рукопись автору не возвращается. Решение о доработке статьи не означает, что она принята к печати. После доработки статья вновь рассматривается рецензентом и редакционной коллегией.

Редакция оставляет за собой право производить редакционные изменения и сокращения, не искажающие основное содержание статьи.

Статьи, не отвечающие перечисленным требованиям, к рассмотрению не принимаются и возвращаются авторам. Датой получения рукописи считается день получения редакцией окончательного варианта.

Авторы несут ответственность за направление в редакцию уже ранее опубликованных статей или статей, принятых к печати другими изданиями.

Редакция предоставляет право первоочередного опубликования статей лицам, осуществляющим послевузовское обучение (аспирантура, докторантура, соискательство) в год завершения обучения. Плата за опубликование статей не взимается.

Всю корреспонденцию следует направлять простыми или заказными письмами (бандеролями) на адрес редакции.

Образец оформления статьи, сведений об авторах, экспертного заключения и текст договора о передаче авторского права размещены на сайте журнала по адресу <http://pfimt.gsu.by>.

Журнал включен в каталог печатных средств массовой информации Республики Беларусь. Индекс журнала: 01395 (для индивидуальных подписчиков), 013952 (для предприятий и организаций).

GUIDELINES FOR AUTHORS

In order for papers submitted to be published in the journal "Problems of Physics, Mathematics and Technics" the following rules should be taken into account:

- the paper should be in agreement with the type of the journal;

- the paper should be an original work, it should not have been submitted for consideration or previously published in the bulk over 25% in another scientific edition and (or) electronic publications with the exception of preprint publication (manuscript) of the paper of the authors (coauthors) on their own website;

- the paper should contain all statutory references to the cited authors and published sources of the borrowed material. The author (coauthors) must obtain all the necessary permissions for the use of materials in the article, in the event that he is (they are) not their right holder (right holders).

The paper should not contain the materials suppressed for publication in the press in accordance with the laws of the Republic of Belarus.

Contents of a paper should be written in line with the scope of the journal. The paper should be written in Russian, Belarusian and English, edited thoroughly and submitted in two copies to the Editorial Office. The manuscript should be printed on A4 white paper with all pages numbered. In addition, the authors must submit the electronic version of their manuscript either on a CD or by e-mail (e-mail: pfmt@gsu.by).

To prepare a paper it is possible to use MS Word for Windows (2000/2003), Times New Roman type, 14 pt. All margins are 2 cm. The author may also use 12 pt LaTeX in standard style article without redefinition of the margins and introduction of the author's commands.

Index UDC is sited in the left corner of the first page. The title of the paper in capital letters is followed by the name(s) of the author(s), authors' affiliations and full postal addresses next to which are an abstract of no more than ten lines and keywords. Relevant keywords should be placed just after the Abstract.

A paper, as a rule, should include Introduction, Body Text, Conclusion and Literature. The title of the paper must be concise. It describes the main idea of your research.

In the Introduction the author gives a brief review of literature, his grounds and specific objectives, he describes links with scientific and practical branches. All background information such as reference to the papers of others authors and some previous publications (including foreign ones) in the field of investigation is necessary.

The main part should contain description of the techniques used and objects of investigation within a large scientific framework. This part may be divided into subsection (with explanatory headings). It provides

the readers with the analysis of the publications on the problem described in these subsections.

Formulas, figures and tables should be sequentially numbered in the framework of the section, for example: (1.1), (2.3), figure 1.1, table 2.1. The author should number only the formulas with appropriate references. The formula number is placed on the right side of the page and the formula itself is centred.

Figures and tables should be put into a contextual framework. The size of figures and charts does not exceed 10x15 cm. Halftone photos should be glossy and contrast. Do not repeat extensively in the text the data you have presented in tables and figures.

Each table should have the heading, in which units of measure describe the values under consideration. All measurements and data should be given in SI units, or if SI units do not exist, in an international accepted unit. The authors are advised to avoid abbreviations except for generally accepted ones (i. e., etc.). Define all abbreviations the first time they are used.

In the Conclusion the received data are described in concise form. The novelty of these results, advantages and possibility of practical use are presented.

Publications cited in the text should be presented in a list of references following the text of the manuscript. References should be given in their original spelling, numbered in the order they appear in the text and contain full bibliography. Please, do not cite unpublished papers. The numbers of references are sited in square brackets (e. g. [1], [2]).

The paper should be signed by all authors.

The following documents should be attached to the article:

- covering letter of the organization in which the work was done with a request for publication;
- information about the authors;
- expert opinion on the possibility of publishing an article in the press;
- treaty on the transfer of the copyright (two copies).

The authors should provide the following information on a separate sheet: surname, first name, patronymic, science degree, rank and correct postal address for correspondence, organization or company name and position, title, research field, home or office phone numbers, and e-mail address.

Then the paper is sent to the Editorial Board to be reviewed. The Editorial Office informs the authors of paper denial and the reviewer's conclusion without returning the manuscript. A request to revise the manuscript does not imply that the paper is accepted for publication since it will be re-reviewed and considered by the Editorial Board. The authors of the rejected paper have the right to apply for its reconsideration.

The Editorial Board has the right to edit the manuscript and abridge it without misrepresenting the paper contents.

Papers not meeting the above requirements are denied and returned to the authors. The date of receipt of the final version by the Editorial Office is considered as the submission date.

Authors are responsible for the submission of their publication because submission is a representation that the paper has not been previously published and is not currently under consideration for publication elsewhere. The Editorial Board charters top-priority for postgraduate students (postgraduate course, persons working for doctor's degree, competitors for scientific degree) during the current year

of the completion of a course. Publication of the paper is free of charge.

Samples of the preparation of an article, information about the authors, expert opinion and the text of the treaty on the transfer of the copyright are placed on the site <http://pfmt.gsu.by>.

The journal «Problems of Physics, Mathematics and Technics» is included in the mass media catalogue of the Republic of Belarus. Index: 01395 (for personal subscribers), 013952 (for enterprises and organizations).