



ISSN 2077-8708

**Проблемы
физики,
математики
и техники**

№4 (57) 2023

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

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:
С.А. Хахомов (Беларусь)

**ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО
РЕДАКТОРА:**
А.В. Рогачёв (Беларусь)
Д.Л. Коваленко (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)
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)
D.L. Kovalenko (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)
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 (57) 2023

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Гайшун В.Е., Семченко А.В., Верлан В., Коваленко Д.Л., Васькевич В.В., Тюленкова О.И., Данильченко К.Д., Маевский А.А., Юлдашев Ш.У. Нанокompозитные материалы, содержащие комплексы редкоземельных элементов, для применения в солнечной энергетике	7
Гиргель С.С. Поляризация и потоки энергии обобщенных астигматических ТМ мод Эрмита – Гаусса	14
Дей Е.А., Тюменков Г.Ю. Приведенные термодинамические коэффициенты в теории реальных газов	20
Кулак Г.В., Николаенко Т.В., Цалко Л.В., Ропот П.И. Двухкоординатная акустооптическая дифракция ограниченных световых пучков в кристаллах парателлурита	25
Можаровский В.В., Киргинцева С.В. Влияние расположения волокон в трубе из композита на параметры гидравлического удара	30
Никитюк Ю.В., Аушев И.Ю. Оптимизация лазерного раскалывания силикатных стекол эллиптическими пучками с использованием параметров механики разрушения	36
Руденков А.С., Пилипцов Д.Г., Купо А.Н., Фролов С.А. Структура и механические свойства углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием	42
Хахомов С.А., Семченко А.В., Гайшун В.Е., Коваленко Д.Л., Васькевич В.В., Данильченко К.Д., Маевский А.А., Малютина-Бронская В.В., Юлдашев Ш.У., Верлан В. Низкотемпературные процессы формирования нанокompозитных пленок для оптоэлектроники	48
Ярмоленко М.А., Цзян Сяо Хун, Рогачев А.А., Рогачев А.В., Руденков А.С., Фролов С.А., Михалко А.М. Синтез и сорбционные свойства покрытий на основе гидроксипропилцеллюлозы, интеркалированных из газовой фазы антибактериальным соединением	53

МАТЕМАТИКА

Гальмак А.М. Степени элементов в l -арных группах специального вида. III	60
Каморников С.Ф., Тютянов В.Н. σ -Проблема Кегеля – Виландта для разбиения $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$	64

ТЕХНИКА

Емельянов В.В., Купо А.Н., Емельянов В.А. Феноменологическая модель травления металлического покрытия в плазме газовой смеси	69
Лавшук О.А., Листопад Н.И. Метод маршрутизации в сетях PoT с использованием кластеризации для протокола RPL	74
Шимановский А.О., Купреева Д.А. Моделирование деформирования слоистого дорожного покрытия с учетом изменения температуры	81

ИНФОРМАТИКА

Сукач Е.И., Биза М.В. Интеллектуальная система управления перекрестком автомобильных дорог	87
Тимошенко Е.В., Ражков А.Ф. Исследование производительности алгоритмов машинного обучения в задачах классификации данных	94

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 29.11.23. Формат 60×84 $\frac{1}{8}$. Бумага офсетная. Гарнитура Times.
Усл. печ. л. 12,32. Уч.-изд. л. 10,73. Тираж 18 экз. Заказ № 625.

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», 2023
© Проблемы физики, математики и техники, 2023
© Problems of Physics, Mathematics and Technics, 2023

PROBLEMS OF PHYSICS, MATHEMATICS AND TECHNICS

SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL

Published since December 2009

Released quarterly

№ 4 (57) 2023

CONTENTS

PHYSICS

Gaishun V.E., Semchenko A.V., Verlan V., Kovalenko D.L., Vaskevich V.V., Tyulenкова O.I., Danilchenko K.D., Maevsky A.A., Yuldashev S.U. Nanocomposite materials containing rare earth complexes for application in solar energy	7
Girgel S.S. Polarization and energy fluxes of generalized astigmatic TM Hermite – Gaussian modes	14
Dey E.A., Tyumenkov G.Yu. Reduced thermodynamic coefficients in the theory of real gases	20
Kulak G.V., Nikolaenko T.V., Tsalko L.V., Ropot P.I. Two-coordinate acoustooptic diffraction of limited light beams in paratellurite crystals	25
Mozharovsky V.V., Kirhintsava S.V. Influence of the arrangement of fibers in a composite pipe on the parameters of water hammer	30
Nikityuk Yu.V., Aushev I.Yu. Optimization of laser cleaving of silicate glasses with elliptical beams using fracture mechanics parameters	36
Rudenko A.S., Piliptsov D.G., Kupo A.N., Frolov S.A. Structure and mechanical properties of carbon coatings doped with zirconium and silicon	42
Khakhomov S.A., Semchenko A.V., Gaishun V.E., Kovalenko D.L., Vaskevich V.V., Danilchenko K.D., Maevsky A.A., Malyutina-Bronskaya V.V., Yuldashev S.U., Verlan V. Low temperature forming processes of nanocomposite films for optoelectronics	48
Yarmolenko M.A., Jiang Xiao Hong, Rogachev A.A., Rogachev A.V., Rudenkov A.S., Frolov S.A., Mikchalko A.M. Synthesis and sorption properties of coatings based on hydroxyethyl cellulose intercalated from the gas phase with antibacterial compounds	53

MATHEMATICS

Gal'mak A.M. Powers in l -ary groups of special form. III	60
Kamornikov S.F., Tyutyanov V.N. The Kegel – Wielandt σ -problem for the partition $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$	64

TECHNICS

Emelyanov V.V., Kupo A.N., Emelyanov V.A. Phenomenological model of metal coating etching in a gas mixture plasma	69
Lavshuk O.A., Listopad N.I. Routing method in IIoT networks using clustering for the RPL protocol	74
Shimanovsky A.O., Kupreyeva D.A. Modeling of the layered pavement deformation considering the temperature change	81

INFORMATION SCIENCE

Sukach E.I., Biza M.V. Intelligent control system for road intersection	87
Timoschenko E.V., Razhkov A.F. Research of the performance of machine learning algorithms in data classification problems.	94

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.

УДК 539.23, 537.39, 661.6

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_7

EDN: ABXCND

НАНОКОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, СОДЕРЖАЩИЕ КОМПЛЕКСЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКЕ

В.Е. Гайшун¹, А.В. Семченко¹, В. Верлан², Д.Л. Коваленко¹, В.В. Васьеви́ч¹,
О.И. Тюленкова¹, К.Д. Данильченко¹, А.А. Маевский¹, Ш.У. Юлдашев³

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Институт прикладной физики, Государственный университет Молдовы, Кишинев

³Центр Нанотехнологических разработок, Национальный университет Узбекистана, Ташкент

NANOCOMPOSITE MATERIALS CONTAINING RARE EARTH COMPLEXES FOR APPLICATION IN SOLAR ENERGY

V.E. Gaishun¹, A.V. Semchenko¹, V. Verlan², D.L. Kovalenko¹, V.V. Vaskevich¹,
O.I. Tyulenkova¹, K.D. Danilchenko¹, A.A. Maevsky¹, S.U. Yuldashev³

¹Francisk Skorina Gomel State University

²Institute of Applied Physics, State University of Moldova, Chisinau

³Center of Nanotechnologies Development, National University of Uzbekistan, Tashkent

Аннотация. Представлена методика получения нанокomпозитных органо-неорганических материалов, легированных редкоземельными элементами. Определены оптимальные режимы формирования композитных полимерных слоев. Установлено влияние исходного состава и режимов термообработки на толщину, адгезию и оптические свойства полученных пленок. Проведены исследования топографии поверхности и спектрально-люминесцентных свойств полученных полимерных пленок.

Ключевые слова: золь-гель, органический полимер, редкоземельные элементы, адгезия, механическая прочность, оптические свойства, люминесценция.

Для цитирования: Нанокomпозитные материалы, содержащие комплексы редкоземельных элементов, для применения в солнечной энергетике / В.Е. Гайшун, А.В. Семченко, В. Верлан, Д.Л. Коваленко, В.В. Васьеви́ч, О.И. Тюленкова, К.Д. Данильченко, А.А. Маевский, Ш.У. Юлдашев // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 7–13. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_7. – EDN: ABXCND

Abstract. Sol-gel technique for obtaining nanocomposite organic-inorganic materials doped with rare earth elements is presented. The optimal regimes for the formation of composite polymer layers have been determined. The influence of the initial composition and heat treatment modes on the thickness, adhesion and optical properties of the resulting films has been established. Studies of the surface topography and spectral-luminescent properties of the synthesized polymer films have been carried out.

Keywords: sol-gel, organic polymer, rare earth elements, adhesion, mechanical strength, optical properties, luminescence.

For citation: Nanocomposite materials containing rare earth complexes for application in solar energy / V.E. Gaishun, A.V. Semchenko, V. Verlan, D.L. Kovalenko, V.V. Vaskevich, O.I. Tyulenkova, K.D. Danilchenko, A.A. Maevsky, S.U. Yuldashev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 7–13. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_7 (in Russian). – EDN: ABXCND

Введение

В настоящее время проводятся исследования в области разработки органических фотоэлектрических элементов. Полимерные материалы, применяемые в этих устройствах, имеют невысокую стоимость, небольшую толщину и гибкость по сравнению с традиционными солнечными элементами.

Принцип работы органических фотоэлектрических элементов аналогичен традиционным солнечными элементами. Преобразование фотонов в электроны состоит из четырех этапов:

поглощение фотонов и образование экситонов; диффузия экситонов на границу между двумя материалами, их диссоциация и разделение зарядов с последующим их переносом на электрод [1].

Органический фотоэлектрический элемент обычно состоит из полимерной подложки, проводящего слоя (к примеру, оксидом индия-олова), фотоактивного слоя, и электродов. Фотоактивный слой состоит из донора и акцептора электронов, которые отвечают за поглощение фотонов, разделение электрических зарядов и их перенос к электродам. Поглощение фотонов

создает экситоны, которые представляют собой пары электрон-дырка, взаимодействующие посредством кулоновского притяжения. Для генерации электрического тока эти электронно-дырочные пары должны разделиться на границе перехода перед рекомбинацией. К сожалению, из-за короткого времени жизни экситона длина диффузии составляет от 10 до 20 нанометров. Это означает, что в процессе возникновения тока участвуют только экситоны, созданные в пределах расстояния диффузии до границы раздела. Когда длина диффузии экситонов выходит за пределы расстояния до границы раздела, генерируемые носители рекомбинируют, прежде чем они успевают разделиться. Необходимо, чтобы активный слой был достаточно толстым для поглощения значительного количества света [2].

Золь-гель технология в настоящее время достаточно широко применяется для синтеза различных материалов, в том числе нанокompозитных, применяемых в технологии получения солнечных элементов [3], [4]. Золь-гель системы обладают такими привлекательными свойствами, как механическая прочность, химическая инертность и возможность изменения характера и силы взаимодействия наночастиц с матрицей [5].

В данной работе предлагается разработанная методика формирования фотоактивного слоя на основе полимерных нанокompозитных органико-неорганических материалов, легированных редкоземельными элементами.

1 Синтез, материалы и методы исследования

Использование поливинилацетата низших альдегидов позволяет получать пленки с высокой адгезией к различным материалам, обладающих хорошей химической стойкостью, прозрачностью и светостойкостью. В качестве полимерной основы был выбран поливинилбутираль благодаря хорошей растворимости в спиртах (метиловом, этиловом, изопропиловом и бутиловом) и совместимости с другими пленкообразователями (феноло-, мочевино-, меламиноформальдегидами, нитратом целлюлозы и др.).

Формирование и синтез нанокompозитных фотоактивных органико-неорганических материалов, содержащих редкоземельные элементы, проходит в три этапа:

- подготовка исходного раствора;
- введение в состав солей редкоземельных элементов;
- формирование тонкой пленки на подложке (нанесение, сушка).

Схема процесса, отражающая технологию получения легированных нанокompозитных материалов, представлена на рисунке 1.1.

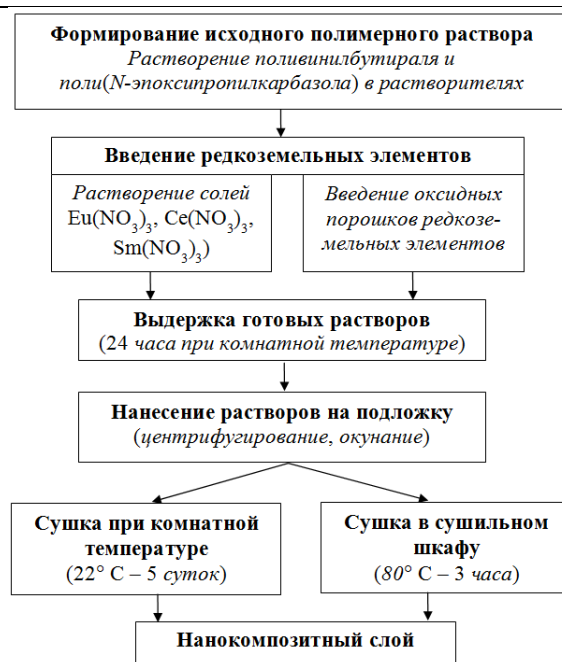


Рисунок 1.1 – Схема получения нанокompозитных материалов, легированных редкоземельными элементами

Для формирования однородных пленок методом центрифугирования исходные растворы должны обладать определенной вязкостью от 3 сСт ($\text{мм}^2/\text{с}$) до 9 сСт ($\text{мм}^2/\text{с}$). При большей вязкости затрудняется растекание раствора, что приводит к образованию неоднородной по толщине пленки и образованию трещин на этапе сушки. Для изучения влияния концентрации поливинилбутираля в этиловом спирте на вязкость провели реологические исследования полученных растворов (таблица 1.1).

Таблица 1.1 – Результаты измерения вязкости полученных растворов на основе поливинилбутираля

Концентрация поливинилбутираля, масс. %	Вязкость, сСт ($\text{мм}^2/\text{с}$)
2	1,67
3	1,84
4	2,16
5	3,41
6	5,45
7	6,83
8	8,12
9	9,2
10	11,73

Результаты исследования показывают, что растворы с концентрацией поливинилбутираля до 4 масс. % имеют низкую вязкость до 2,16 сСт, при нанесении таких растворов на подложку методом центрифугирования происходит растекание

раствора и быстрое испарение практически без образования пленки.

Растворы с концентрацией поливинилбутирала 9 масс. % и более имеют высокую вязкость более 9 сСт, при нанесении таких растворов на подложку методом центрифугирования происходит медленное растекание раствора с образованием волнообразных разводов и неровностей поверхности получаемой пленки.

Таким образом, оптимальными для формирования однородных пленок методом центрифугирования являются концентрации поливинилбутирала в этиловом спирте от 5 масс. % до 8 масс. %.

Для синтеза легированных нанокomпозитных органо-неорганических материалов в полученный раствор вводили соли нитратов европия и церия, а также заранее синтезированные методами химического осаждения и методом Печини нанокристаллические порошки европия. После полного растворения солей и перемешивания до однородного состояния готовые растворы выдерживают в темном месте при комнатной температуре в течение суток.

Разрабатываемый полимерный нанокomпозит будет использоваться в солнечном элементе в качестве активного слоя, поэтому он должен обладать необходимыми физическими свойствами, наиболее существенными из которых являются прочность сцепления полимера с материалом подложки для формирования многослойной структуры солнечного элемента и механическая прочность для предотвращения повреждения активного полимерного слоя. Для дальнейшего исследования была приготовлена серия образцов на основе 5% раствора поливинилбутирала в различных растворителях, легированных редкоземельными элементами.

Для исследования показателя преломления и толщины полученных образцов был использован быстродействующий лазерный эллипсомер ЛЭФ-757, который предназначен для проведения измерений толщин и оптических констант тонкопленочных материалов.

Исследования оптических свойств (спектров поглощения и пропускания) полученных материалов в видимой области от 300 нм до 800 нм проводились с использованием спектрофотометра Varian CARY 50.

Для исследования топографии поверхности полученных полимерных пленок на основе поливинилбутирала, содержащих наноструктурные порошки европия, провели исследования поверхности с использованием сканирующего зондового микроскопа СОЛБЕР Р47-PRO (ООО НТ-МДТ, Москва).

Измерения проводили в 5 разных точках пластины. Результаты исследования показывают, что пленки на основе поли(Н-эпоксипропилкарбазола) и поливинилбутирала имеют схожий показатель преломления около 1,5. Толщина

полученных полимерных слоев варьируется в диапазоне от 2,8 мкм для пленок из поли(Н-эпоксипропилкарбазола) до 3,1 мкм для пленок на основе поливинилбутирала. Это может быть связано с большей исходной концентрацией поливинилбутирала (5–7 %) по сравнению с концентрацией поли(Н-эпоксипропилкарбазола) (1–2 %). Использование в качестве растворителя различных растворителей не влияет на показатель преломления и толщину получаемых полимерных слоев.

Испытание адгезионных свойств выполняется в целях контроля качества и применяется для соблюдения промышленных стандартов и технических условий. Исследование адгезии проводили согласно ГОСТ 31149-2014 методом решетчатого надреза [6]. Установлено, что использование различных растворителей не оказывает существенного влияния на адгезию к подложке полученных полимерных композиционных покрытий. Все покрытия, не зависимо от растворителя, имеют самый высокий класс адгезии согласно ГОСТ 31149-2014 – Класс 0 (края надрезов полностью гладкие; ни один из квадратов в решетке не отслоился). Стоит отметить, что использование в качестве растворителя изопропилового спирта приводит к образованию незначительных сколов и осыпанию покрытия по краю надреза.

Для определения механической прочности тонких покрытий чаще всего применяют склерометрический метод и метод истирания. Наиболее подходящими методами определения механической прочности тонких покрытий являются те, которые основаны на определении прочности покрытий к истиранию. Прочность полученных в ходе выполнения работы покрытий определялась методом истирания резиновым наконечником, изготовленным из пищевой резины средней плотности (П-С), через батистовую прокладку при следующих параметрах: частота вращения, мин^{-1} – от 30 до 100, число оборотов – 3000, нагрузка на наконечник – 200 г, расстояние от оси вращения – 5 мм. Результаты исследования указывают, что полученные покрытия обладают механической стойкостью к истиранию более 3000 циклов, что позволяет их использовать для формирования многослойной структуры солнечного элемента.

2 Результаты исследования и их обсуждение

Для определения максимально допустимой температуры обработки получаемых пленок на основе растворов поливинилбутирала и установления влияния используемого растворителя на оптические и спектрально-люминесцентные свойства проведены исследования оптических свойств получаемых материалов. Результаты исследования представлены на рисунках 2.1–2.2.

Результаты исследования показывают, что при температурах сушки вплоть до 125° С изменений в оптических характеристиках полученных пленок нет. При увеличении температуры сушки больше 125° С происходит деградация поливинилбутирала, что приводит к резкому снижению оптических свойств. Увеличение концентрации вводимых солей церия приводит к снижению пропускания на 2–3%, что связано с увеличением рассеивания в пленках. Использование растворителей различного типа не оказывает существенного влияния на оптические свойства получаемых пленок.

Результаты исследования топографии поверхности полученных полимерных пленок на основе поливинилбутирала, содержащих наноструктурные порошки европия, (рисунок 2.3) указывают на однородную структуру полученных пленок без

видимых включений. Это свидетельствует о том, что пленки имеют аморфную структуру.

Шероховатость поверхности изменяется в пределах от 5 нм до 7 нм, что свидетельствует о равномерном распределении наноструктурных порошков европия по поверхности пленки.

Результаты исследования фотолюминесцентных свойств полученных материалов показывают, что полученные материалы имеют низкую интенсивность свечения, что может быть связано с низким содержанием редкоземельных элементов в составе. Для увеличения фотолюминесцентных свойств в получаемых материалах необходимо перейти от использования солей редкоземельных элементов к синтезируемым нанокристаллическим порошкам комплексного состава, которые должны обеспечить более выраженные фотолюминесцентные свойства получаемых материалов.

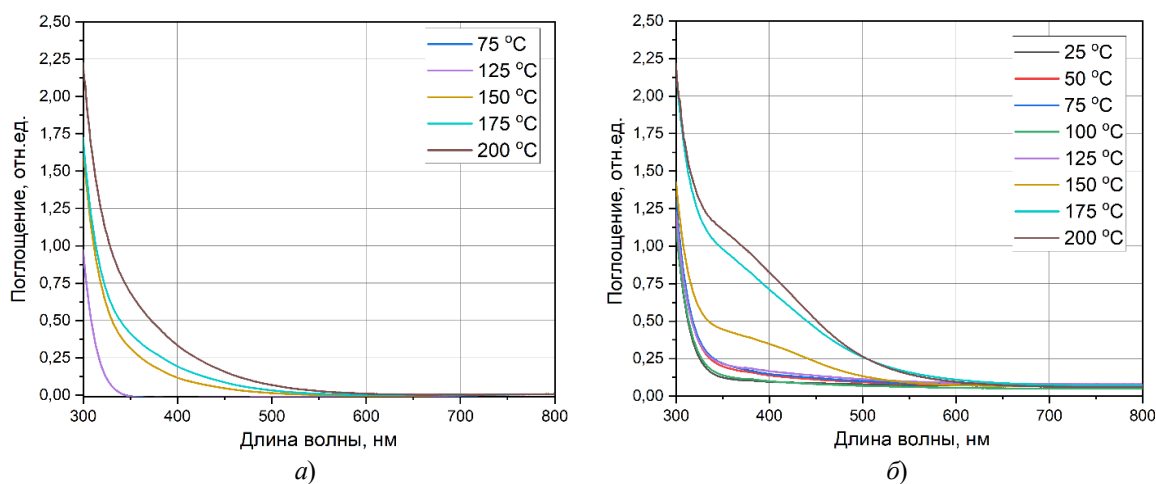


Рисунок 2.1 – Спектры поглощения пленок поливинилбутирала: а) с бутиловым спиртом; б) с изопропиловым спиртом

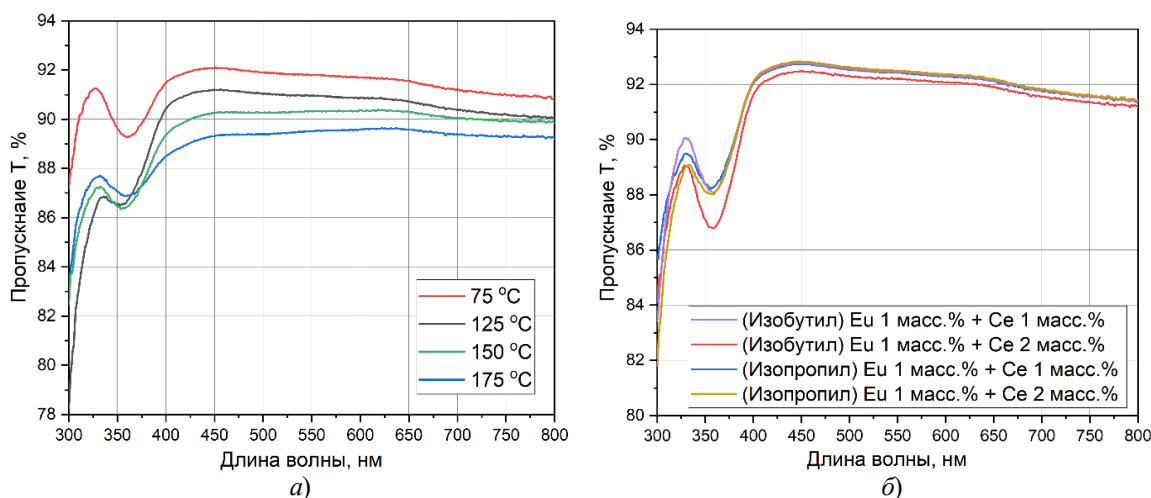


Рисунок 2.2 – Спектры поглощения пленок поливинилбутирала, содержащих редкоземельные соединения европия и церия: а) в зависимости от температуры обработки; б) в зависимости от состава

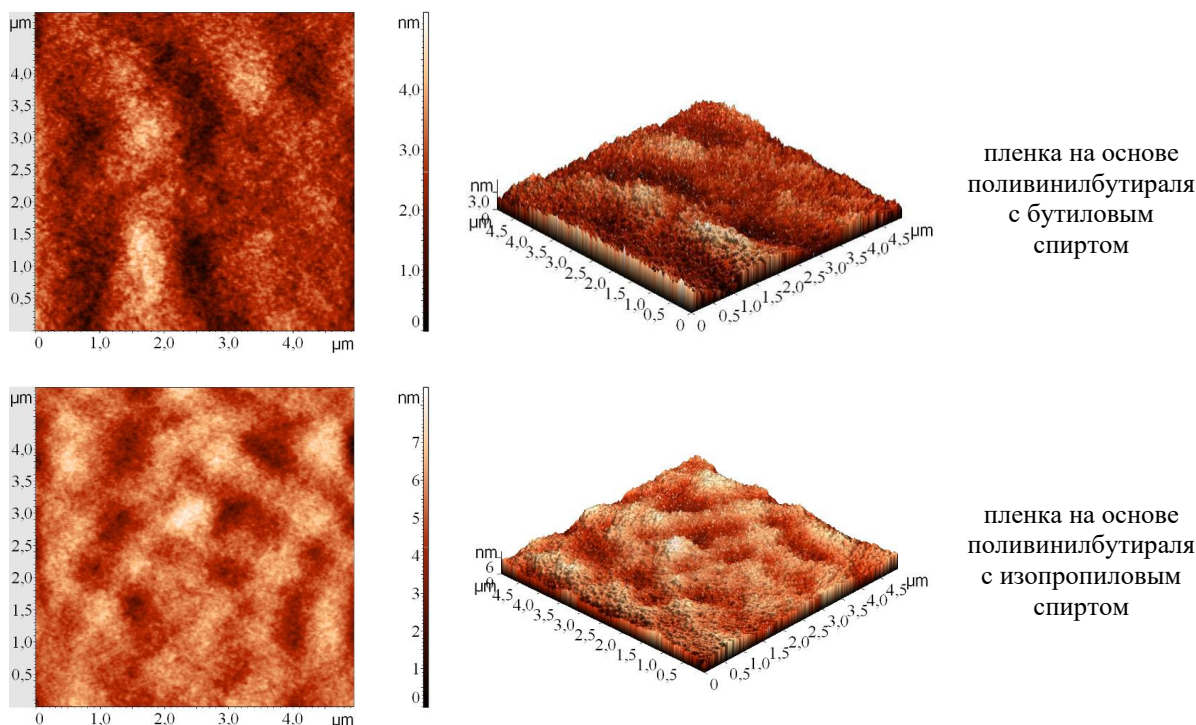


Рисунок 2.3 – Топография поверхности полимерных пленок, содержащих 2 масс.% наноструктурного порошка европия

На рисунке 2.4 показан спектр люминесценции высокого разрешения ($0,2 \text{ см}^{-1}$) для переходов $^5D_i \rightarrow ^7F_{0-3}$ и $^5D_0 \rightarrow ^7F_1$ при 300 К. Полосы переходов из верхнего возбужденного состояния 5D_0 обычно очень слабы. Полоса при длине волны 580 нм, относящаяся к переходу $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$, относится к переходам $4f \rightarrow 4f$ с очень малой полушириной (0,48 нм).

На рисунке 2.5 показано положение полосы излучения фотолюминесценции $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ при различных концентрациях. Спектр люминесценции перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ показывает, что полоса действительно состоит из основного компонента (около 99% интегральной интенсивности) и дополнительного очень слабого компонента, что вероятно связано с дефектными состояниями.

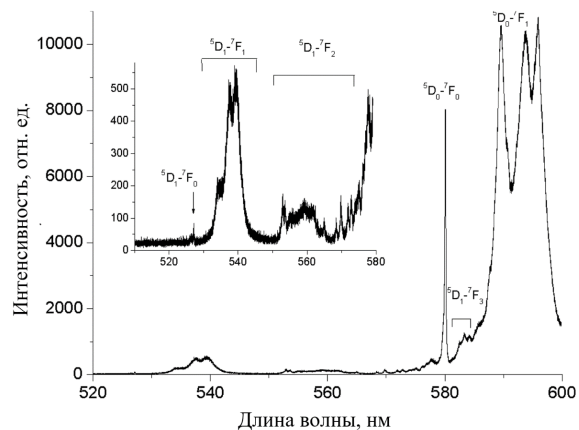


Рисунок 2.4 – Спектр люминесценции наноструктурного порошка европия

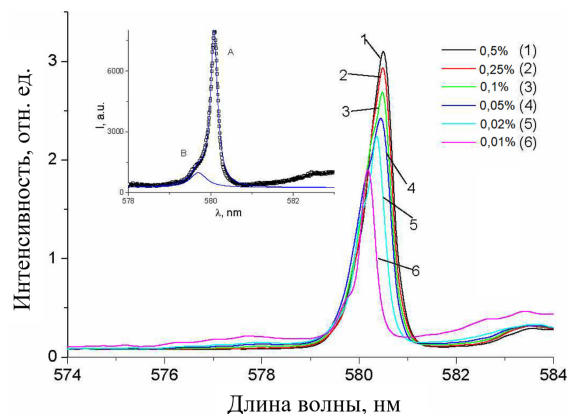


Рисунок 2.5 – Спектр люминесценции пленок поли(N-эпоксипропилкарбазола) с различным содержанием наноструктурного порошка европия

Характерный переход $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ свидетельствует о том, что ион Eu(III) занимает позицию симметрии C_{nv} , C_n или C_s . Поскольку как возбужденное, так и основное состояние перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ являются невырожденными, отдельный пик полосы $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ соответствует отдельному иону Eu(III) в нанокристалле.

В катодолюминесцентном спектре одного из полученных порошков европия проявляются полосы люминесценции, связанные с Eu^{3+} , и широкая полоса с максимумом около 460 нм (рисунок 2.6). При рассмотрении переходов Eu^{3+} с уровня 5D_0 в спектре можно установить, что он характерен для аморфного оксидного соединения, где Eu^{3+} занимает позиции, преимущественно близкие к C_{2v} .

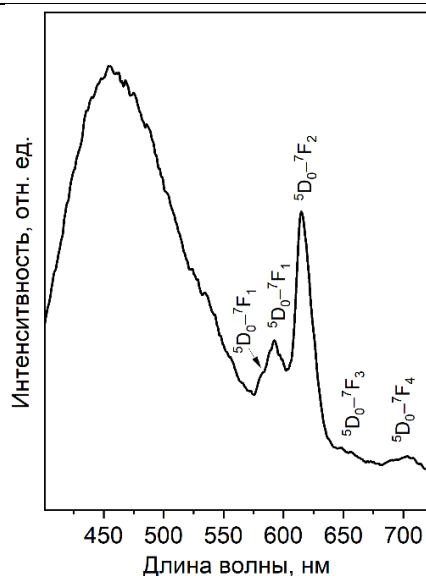


Рисунок 2.6 – Спектр люминесценции наноструктурированного порошка европия

При детальном рассмотрении переходов Eu^{3+} (рисунок 2.6) можно установить, что в спектрах появляются дополнительные полосы в области переходов ${}^5\text{D}_0 - {}^7\text{F}_1$ и ${}^5\text{D}_0 - {}^7\text{F}_4$, не характерные для аморфных соединений.

Заключение

Разработана методика получения нанокомпозитных органо-неорганических пленок, легированных редкоземельными элементами. Приготовлена серия стабильных растворов на основе поливинилбутираля в различных растворителях. Проведены исследования вязкости полученных растворов, экспериментальным путем установлено, что оптимальной является концентрация поливинилбутираля в этиловом спирте от 5 масс. % до 8 масс. %. При установленных концентрациях исходные растворы имеют однородную структуру и необходимую вязкость для нанесения методом центрифугирования.

Проведены исследования показателя преломления и толщины полученных полимерных слоев. Полученные пленки имеют толщину от 2,85 до 3,1 мкм и показатель преломления равный 1,5, что согласуется с результатами, представленными в публикациях [7].

Проведены исследования адгезии получаемых материалов. Установлены зависимости физических свойств полученных материалов от условий синтеза, типа растворителя и метода нанесения на подложку. Установлено, что использование различных растворителей не оказывает существенного влияния на адгезию к подложке полученных полимерных композиционных покрытий. Все покрытия имеют самый высокий класс адгезии. Установлено, что при увеличении температуры сушки свыше 150°C адгезия

покрытий снижается. Полимерные покрытия, прошедшие термообработку при $(175-200)^\circ\text{C}$, имеют класс адгезии – 1.

Установлено, что при температурах сушки вплоть до 125°C изменений в оптических характеристиках полученных пленок нет. При увеличении температуры сушки больше 125°C происходит деградация поливинилбутираля, что приводит к ухудшению оптических и спектрально-люминесцентных свойств. Увеличение концентрации вводимых солей редкоземельных элементов приводит к ухудшению пропускания на 2–3%. Использование растворителей различного типа не оказывает влияния на оптические свойства получаемых пленок.

Проведены исследования топографии поверхности полученных полимерных пленок, содержащих наноструктурные порошки европия. Результаты исследования указывают на однородную структуру полученных пленок без видимых включений. Шероховатость поверхности изменяется в пределах от 7 нм до 9 нм, что свидетельствует о равномерном распределении наноструктурных порошков европия по поверхности пленки.

Из результатов анализа спектрально-люминесцентных свойств полученных материалов следует, что ион $\text{Eu}(\text{III})$ занимает позицию симметрии C_{nv} , C_n или C_s . Поскольку как возбужденное, так и основное состояние перехода ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$ являются невырожденными, отдельный пик полосы ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$ соответствует отдельному иону $\text{Eu}(\text{III})$ в нанокристалле.

Разработанные нанокомпозитные материалы, содержащие комплексы редких земель, являются перспективными материалами в качестве фотоактивного слоя для получения органических фотоэлектрических элементов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Солнечные элементы на основе органических и органо-неорганических материалов / В.В. Лобанов, М.И. Теребинская, О.В. Филоненко, О.И. Ткачук // Поверхность. – 2019. – № 11 (26). – С. 270–343.
2. Photoluminescence properties of new dinuclear $[\text{Eu}(\mu_2\text{-OC}_2\text{H}_5)(\text{btfa})(\text{NO}_3)(\text{phen})]_2\text{phen}$ and mononuclear $\text{Eu}(\text{TFA})_3(\text{Ph}_3\text{PO})_2$ complexes / V.I Verlan, I.P. Culeac, O. Bordian, M.S. Iovu, A.I. Bulhac, V.E. Zubareva, A.V. Semchenko // Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics, and Nanotechnologies XI. – 2023. – Vol. 12493. – P. 1249305.
3. Pandey, P. Rare earth ion (La, Ce, and Eu) doped ZnO nanoparticles synthesized via sol-gel method / P. Pandey, R. Kurchania, F.Z. Haque // Application in dye sensitized solar cells. Optics and Spectroscopy. – 2015. – Vol. 119 (4). – P. 666–671.

4. *Strong coupling of plasmon and nanocavity modes for dual-band, near-perfect absorbers and ultrathin photovoltaics* / C. Hägglund, G. Zeltzer, R. Ruiz, A. Wangperawong, K.E. Roelofs, S.F. Bent // ACS Photonics. – 2016. – Vol. 3 – P. 456–463.

5. *Активные слои легированные редкоземельными металлами для повышения эффективности солнечных элементов* / В.В. Малютина-Бронская, В.Б. Залесский, Т.Р. Леонова, А.М. Поликанин, В.А. Мудрый, А.В. Семченко, В.В. Сидский // Проблемы физики, математики и техники. – 2012. – № 4 (13). – С. 26–29.

6. *ГОСТ 31149-2014 Материалы лакокрасочные. Определение адгезии методом решетчатого надреза.* – Введ. 01.09.2015. – Москва: ИПК Издательство стандартов, 2015. – 12 с.

7. *Novel conductive multi-walled polymeric nanotubes of poly(diazoaminobenzene) for single-layer polymer solar cell* / S. Shabzendedar, A.R. Modarresi-Alam, A. Bahrpeyma, M. Noroozifar, K. Kerma // Reactive and Functional Polymers. – 2020. – Vol. 149. – P. 104529.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проекты Т22МЛД-003 и Т22УЗБ-074 и НАЦР Республики Молдова, проекты 20.80009.5007.14, 22 80013.5007.6ВІ.

Поступила в редакцию 05.09.2023.

Информация об авторах

Гайшуи Владимир Евгеньевич – к.ф.-м.н., доцент
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Верлан Виктор Ион – д.ф.-м.н.
Коваленко Дмитрий Леонидович – к.ф.-м.н., доцент
Васькевич Василий Васильевич – ст. преподаватель
Тюленкова Ольга Ивановна – ст. науч. сотр.,
Данильченко Константин Дмитриевич – мл. науч. сотр.
Маевский Александр Артурович – мл. науч. сотрудник
Юлдашев Шавкат Узгенович – д.ф.-м.н., профессор

ПОЛЯРИЗАЦИЯ И ПОТОКИ ЭНЕРГИИ ОБОБЩЕННЫХ АСТИГМАТИЧЕСКИХ ТМ МОД ЭРМИТА – ГАУССА

С.С. Гиргель

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

POLARIZATION AND ENERGY FLUXES OF GENERALIZED ASTIGMATIC TM HERMITE – GAUSSIAN MODES

S.S. Girgel

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Предложены новые векторные решения параболического уравнения, описывающие векторные астигматические ТМ световые пучки Эрмита – Гаусса. Исследуются поляризационные и энергетические свойства таких пучков. Проведено графическое моделирование эллипсов поляризации, интенсивности и поперечных потоков энергии векторных астигматических ТМ световых пучков Эрмита – Гаусса.

Ключевые слова: ТМ-моды, астигматические пучки, пучки Эрмита – Гаусса, поперечные потоки энергии.

Для цитирования: Гиргель, С.С. Поляризация и потоки энергии обобщенных астигматических ТМ мод Эрмита – Гаусса / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 14–19. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_14. – EDN: ADFHDR

Abstract. New vector solutions of the parabolic equation describing vector astigmatic TM Hermite – Gaussian light beams are proposed. The polarization and energy properties of such beams are investigated. The graphical modeling of the ellipses of polarization, the intensity and transverse energy fluxes of vector astigmatic TM Hermite – Gaussian light beams is carried out.

Keywords: TM-modes, astigmatic beams, Hermite – Gaussian beams, transverse energy fluxes.

For citation: Girgel, S.S. Polarization and energy fluxes of generalized astigmatic TM Hermite – Gaussian modes / S.S. Girgel // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 14–19. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_14 (in Russian). – EDN: ADFHDR

Введение

Световые пучки занимают важную часть общей оптики. Чаще всего обсуждаются скалярные световые пучки, например, [1]–[5]. Векторные пучки рассматриваются реже [6]–[16]. Обычно рассматриваются векторные световые пучки однородной поляризации по сечению пучка. Векторные пучки с неоднородной поляризацией, например ТЕ или ТМ-моды рассматриваются значительно реже [8]–[16]. В наших работах обсуждались циркулярные ТМ пучки Куммера [15], ТМ пучки Бесселя – Гаусса [15]. Все эти пучки характеризуются цилиндрической симметрией. Перейдем к обсуждению неоднородно поляризованных векторных световых пучков с декартовой симметрией. В [8] исследовались ТЕ и ТМ гауссовы моды. После астигматического гауссова пучка [1], [8], самым распространенным является пучок Эрмита – Гаусса. Как ни удивительно, в большинстве случаев рассматриваются только скалярные [1], [2], или векторные пучки Эрмита – Гаусса с однородной поляризацией [7]. В статье [14] обсуждаются ТЕ- и ТМ-моды только для инвариантных световых полей (Бесселя, Матье и Вебера). В работе [12] рассматриваются ТЕ- и

ТМ-моды для параксиальных векторных полей. Однако эти поля являются следствием решений уравнения Гельмгольца, поэтому там нет, например, пучков Эрмита – Гаусса и Лагерра – Гаусса. В работе Фадеевой [13] обсуждаются поляризационные свойства только стандартных ТЕ и ТМ пучков Эрмита – Гаусса при $Z=0$. Однако существуют [1] также ещё элегантные и обобщенные пучки Эрмита – Гаусса. Кроме того, в работе [13] не рассматривались энергетические характеристики таких пучков.

В настоящей работе мы будем изучать обобщенные векторные пучки Эрмита – Гаусса с неоднородной поляризацией, их векторные поляризационные и энергетические свойства. Сначала в разделе 1 обсуждаются поляризационные и энергетические характеристики векторных пучков Эрмита – Гаусса с однородной поляризацией. Затем, в разделе 2, обсуждаются поляризационные и энергетические характеристики векторных ТМ пучков Эрмита – Гаусса. Проведено графическое моделирование интенсивности и поперечных потоков энергии. Выполнен анализ полученных результатов, который подтвердил и проиллюстрировал аналитические расчеты.

1 Векторные астигматические пучки Эрмита – Гаусса с неоднородной поляризацией

Скалярную амплитуду обобщенных 3D астигматических эрмито-гауссовых световых пучков можно записать в виде произведения двух независимых 2D пучков $f = f_x f_y$, где

$$f_x = \frac{1}{2} \left(\frac{Q_x(0) P_x(Z)}{Q_x(Z) P_x(0)} \right)^{\frac{n}{2}} H_n(a_1 X) G_x,$$

$$f_y = \frac{1}{2} \left(\frac{Q_y(0) P_y(Z)}{Q_y(Z) P_y(0)} \right)^{\frac{m}{2}} H_m(a_2 Y) G_y. \quad (1.1)$$

В амплитуде f 2D гауссианы

$$G_x = \sqrt{\frac{Q_x(0)}{Q_x(Z)}} \exp\left(\frac{iX^2}{Q_x(Z)}\right)$$

и

$$G_y = \sqrt{\frac{Q_y(0)}{Q_y(Z)}} \exp\left(\frac{iY^2}{Q_y(Z)}\right)$$

образуют общий 3D гауссиан $G = G_x G_y$ с простым астигматизмом. Все переменные и параметры здесь и далее записаны в безразмерной форме. H_m и H_n – полиномы Эрмита с индексами m и n соответственно. Безразмерные переменные $X = x/x_0$, $Y = y/y_0$, $Z = z/z_0$, где $x_0 > 0$, $z_0 = kx_0^2/2$ – характерные линейные размеры пучка в поперечном и продольном направлениях соответственно. $K = kx_0$ – безразмерное волновое число, согласующие множители

$$a_{1,2} = \sqrt{i \left(\frac{1}{P_{x,y}} - \frac{1}{Q_{x,y}} \right)}, \quad (1.2)$$

$i = \sqrt{-1}$. Выше введены четыре параметра пучка $Q_{x,y}(Z) = Z - Q_{0x,0y}$ и $P_{x,y}(Z) = Z - P_{0x,0y}$, причем свободные параметры $Q_{0x,0y}$ и $P_{0x,0y}$ являются комплексными: $Q_{0x,0y} = Q'_{0x,0y} + iQ''_{0x,0y}$; $P_{0x,0y} = P'_{0x,0y} + iP''_{0x,0y}$. Таким образом, скалярный обобщенный пучок Эрмита – Гаусса с простым астигматизмом в общем случае зависит от безразмерных переменных X, Y, Z , от двух целочисленных индексов m и n , волнового числа K , четырех комплексных свободных параметров $Q_{0x}, P_{0x}, Q_{0y}, P_{0y}$.

В зависимости от соотношений между свободными параметрами $Q_{0x,0y}$ и $P_{0x,0y}$ возможны различные типы пучков. Например, для 2D мод в плоскости (X, Z) в общем случае имеем обобщенные (general) 2D пучки, характеризующиеся амплитудами f_{xg} , которые при $P_x = Q_x^*$ редуцируются к 2D стандартным (standard) пучкам Эрмита – Гаусса с амплитудами f_{xs} , а при $P_{0x} \rightarrow \infty$ – сводятся к элегантным (elegant) модам с амплитудами f_{xe} . Аналогично, в плоскости

(Y, Z) возможны обобщенные, стандартные и элегантные моды f_{yg}, f_{ys}, f_{ye} соответственно. В итоге имеем 6 типов скалярных 3D пучков Эрмита – Гаусса:

$$f_{gg} = f_{xg} f_{yg}, \quad f_{sg} = f_{xs} f_{yg}, \quad f_{eg} = f_{xe} f_{yg},$$

$$f_{gs} = f_{xg} f_{ys}, \quad f_{ge} = f_{xg} f_{ye}, \quad f_{ee} = f_{xe} f_{ye}.$$

Векторные пучки Эрмита – Гаусса с однодородной поляризацией (стандартные моды) обсуждались нами в работе [7]. Поэтому перейдем теперь к изучению векторным ТМ-мод Эрмита – Гаусса с простым астигматизмом. Векторы электрического и магнитного полей обобщенной ТМ-моды параксиальной световой волны можно представить [8], [15], как

$$\mathbf{E} = \nabla_{\perp} f + \frac{4}{K} \mathbf{e}_z \partial_z f; \quad \mathbf{H} = n[\mathbf{e}_z, \nabla_{\perp} f].$$

Вычисляя, получаем $\mathbf{E} = \mathbf{e}_x E_x + E_y \mathbf{e}_y + E_z \mathbf{e}_z$; $\mathbf{H} = n(E_x \mathbf{e}_y - E_y \mathbf{e}_x)$, где

$$E_x = \left(\frac{na_1 H_{n-1}}{H_n} + \frac{iX}{Q_x} \right) f; \quad E_y = \left(\frac{ma_2 H_{m-1}}{H_m} + \frac{iY}{Q_y} \right) f;$$

$$E_z = -\frac{2f}{K} \left(\frac{na_1 X H_{n-1}}{H_n} \left(\frac{1}{P_x} + \frac{1}{Q_x} \right) + \frac{ma_2 Y H_{m-1}}{H_m} \left(\frac{1}{P_y} + \frac{1}{Q_y} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{Q_x} + \frac{1}{Q_y} \right) + i \left(\frac{X^2}{Q_x^2} + \frac{Y^2}{Q_y^2} \right) - \frac{n}{2} \left(\frac{1}{P_x} - \frac{1}{Q_x} \right) - \frac{m}{2} \left(\frac{1}{P_y} - \frac{1}{Q_y} \right) \right).$$

Проекция $H_z = 0$, поскольку мы обсуждаем ТМ-моды.

Для физически реализуемых пучков конечной мощности должна выполняться квадратичная интегрируемость (КИ) функции \mathbf{E}_{\perp} . Анализ показал, что необходимые и достаточные условия КИ ТМ-мод Эрмита – Гаусса – $[Q'_{0x} > 0, Q'_{0y} > 0]$, как и для скалярных пучков. При этом во всех случаях комплексные параметры P_{0x}, P_{0y} не влияют на КИ.

2 Поляризационные и энергетические характеристики векторных обобщенных параксиальных ТМ-мод Эрмита – Гаусса

Введем, следуя формализму [16], комплексный угол $\psi = \psi' + i\psi''$ соотношением

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

тогда азимут эллипса поляризации световой волны равен ψ' , а ее эллиптичность γ выражается как $\gamma = th\psi''$. Поляризация ТМ-мод Эрмита – Гаусса в сечении пучка в общем случае эллиптическая, зависит от координат X, Y и не зависит явно от гауссиана G .

Плотности энергии, продольного и поперечного потоков энергии электромагнитного поля для параксиальных векторных пучков с неоднородной поляризацией (ТМ-моды) соответственно равны [8]:

$$w = \frac{\varepsilon(|E_x|^2 + |E_y|^2)}{8\pi}; \quad S_z = \frac{c}{n} w;$$

$$\mathbf{S}_\perp = -\frac{c\varepsilon}{8\pi n} \cdot \text{Re}(\mathbf{E}_\perp^* E_z) =$$

$$= -\frac{c\varepsilon}{8\pi n} \cdot \text{Re}(\mathbf{e}_x E_x^* E_z + \mathbf{e}_y E_y^* E_z). \quad (2.1)$$

В последнем выражении целесообразно выделить явно, следуя Берри и Бекшаеву [9]–[11], плотность орбитального \mathbf{S}_o и спинового \mathbf{S}_s потоков энергии. Получаем $\mathbf{S}_\perp = \mathbf{S}_o + \mathbf{S}_s$, где

$$\mathbf{S}_o = \frac{c\varepsilon}{8\pi n K} \text{Im}(\mathbf{e}_x (E_x^* \cdot \partial_x E_x + E_y^* \cdot \partial_x E_y) +$$

$$+ \mathbf{e}_y (E_x^* \cdot \partial_y E_x + E_y^* \cdot \partial_y E_y)), \quad (2.2)$$

$$\mathbf{S}_s = \frac{c\varepsilon}{8\pi n K} (\mathbf{e}_x \partial_y - \mathbf{e}_y \partial_x) \text{Im}(E_x^* E_y). \quad (2.3)$$

Видим, что

$$|S_o|/|S_z| \cong K^{-1} \ll 1, \quad |S_s|/|S_z| \cong K^{-1} \ll 1,$$

что естественно для параксиальных пучков.

Нами проводилось графическое моделирование поперечных потоков энергии и интенсивности ТМ мод параксиальных пучков Эрмита – Гаусса. Некоторые результаты изображены на рисунках 2.1–2.6 при различных значениях свободных параметров. Выбирались параметры

$Q_{0x}'' > 0, Q_{0y}'' > 0$, чтобы обеспечить КИ функций векторной амплитуды пучков Эрмита – Гаусса и, тем самым, переносимую конечную мощность через поперечное сечение пучка.

Поляризация ТМ мод Эрмита – Гаусса является сильно неоднородной по поперечному сечению пучка и, в общем случае, эллиптической. При переходах от радиального расстояния до $R \rightarrow \infty$ поляризация трансформируется от линейной через круговую постепенно к линейной радиальной (исключая области, близкие к осям OX и OY). При $Z = 0$ поляризация всегда линейная неоднородная. На рисунке 2.1 видно, что плоскости XZ и YZ являются плоскостями симметрии. Таким образом, точечная группа симметрии картин эллипсов поляризации – $m_x m_y 2_z$. Вдоль осей OX и OY – строго линейная поляризация.

На рисунках 2.2–2.6 показаны некоторые характерные картины интенсивностей в относительных единицах и направлений поперечных потоков энергии \mathbf{S}_\perp для ТМ мод Эрмита – Гаусса. Видно, что, как и для эллипсов поляризации, точечная группа симметрии картин поперечных потоков энергии и интенсивностей попрежнему остается $m_x m_y 2_z$. При увеличении радиального расстояния R поперечные потоки энергии постепенно становятся радиальными. Хотя симметрия интенсивности поперечных потоков энергии и картин полной интенсивности пучка одинакова, качественно эти интенсивности различаются. Например, как ясно видно на рисунках 2.2–2.6, их максимумы различны.

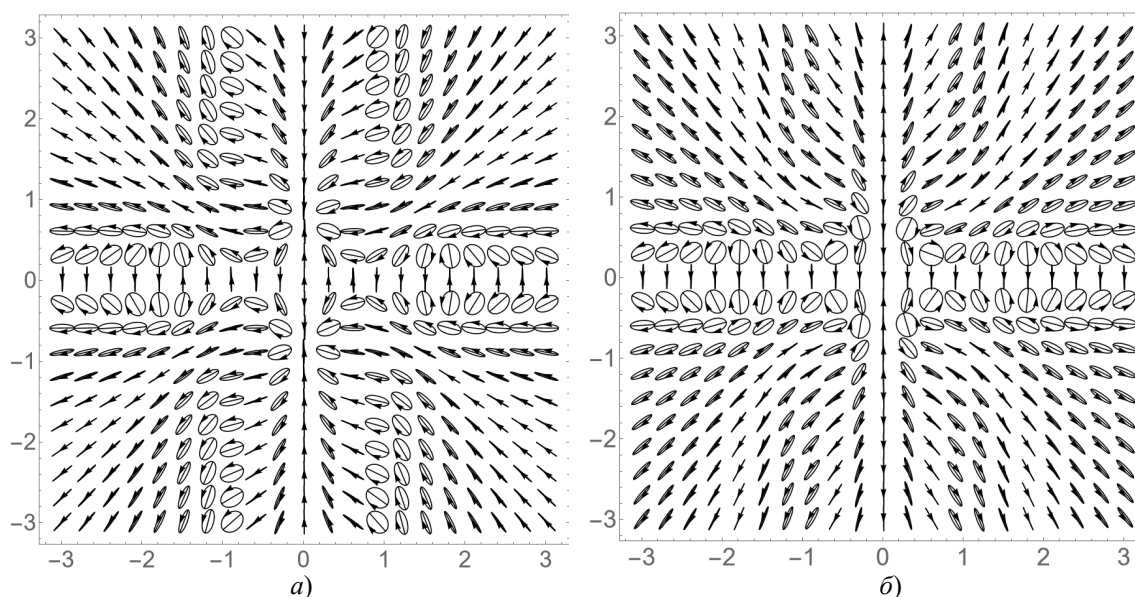


Рисунок 2.1 – Эллипсы поляризации обобщенных и элегантных ТМ мод Эрмита-Гаусса:

а) обобщенные ТМ-gg моды. Свободные параметры: $Q_{0x}'' = 0,8; Q_{0y}'' = 0,3; P_{0x}'' = -2; P_{0y}'' = 2; Q_{0y}'' = 0,8;$

б) элегантные ТМ-ee моды. Свободные параметры: $Q_{0x}'' = 0,8; Q_{0y}'' = 0,3; P_{0x}'' \rightarrow \infty; P_{0y}'' \rightarrow \infty; Q_{0y}'' = 0,8$

На всех рисунках взяты следующие значения свободных параметров: $n = 2$; $m = 1$; $K = 1000$; $Q'_{0x} = Q'_{0y} = P'_{0x} = P'_{0y} = 0$. Графическое моделирование показало, что изменение отличных от нуля свободных параметров Q''_{0x} , Q''_{0y} , Q''_{0y} , Q''_{0x} сильно влияет на поляризационные и энергетические свойства ТМ мод Эрмита – Гаусса. В то же время, варьирование параметров P''_{0x} , P''_{0y} , P''_{0x} , P''_{0y} слабо воздействует на физические свойства ТМ мод Эрмита – Гаусса.

На рисунках 2.4 и 2.6 изображены линии плотностей орбитального и спинового потоков энергии вместе с их интенсивностями. Видно, что линии орбитального потока энергии ориентированы, в основном, вдоль радиальных направлений, а линии спинового потока энергии – вдоль азимутальных направлений. Максимумы их интенсивностей не совпадают с максимумами общей интенсивности пучка.

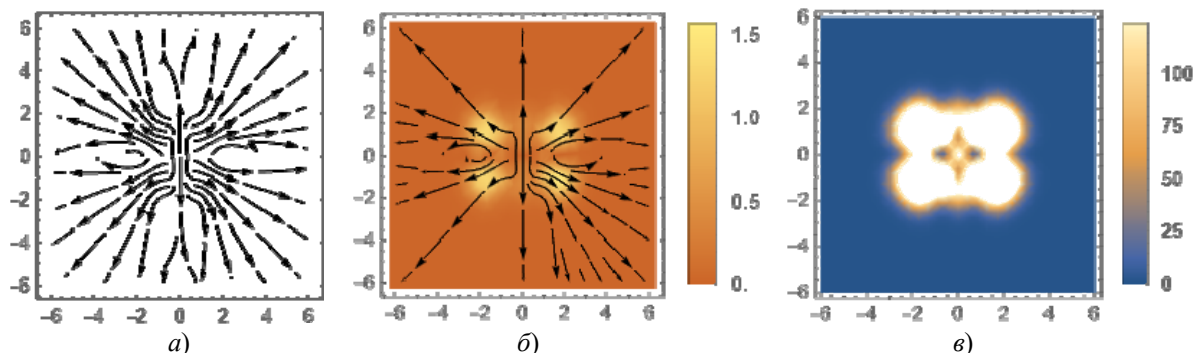


Рисунок 2.2 – Поперечный поток энергии и интенсивность векторных пучков Эрмита – Гаусса (обобщенных ТМ-gg мод): а) линии поперечного потока в поперечном сечении XOY ; б) линии поперечного потока вместе с его интенсивностью; в) полная интенсивность пучка в поперечном сечении XOY . Используемые параметры: $Q''_{0x} = 0,8$; $Q''_{0y} = 0,8$; $P''_{0x} = -2$; $P''_{0y} = 2$; $Q''_{0y} = 0,8$

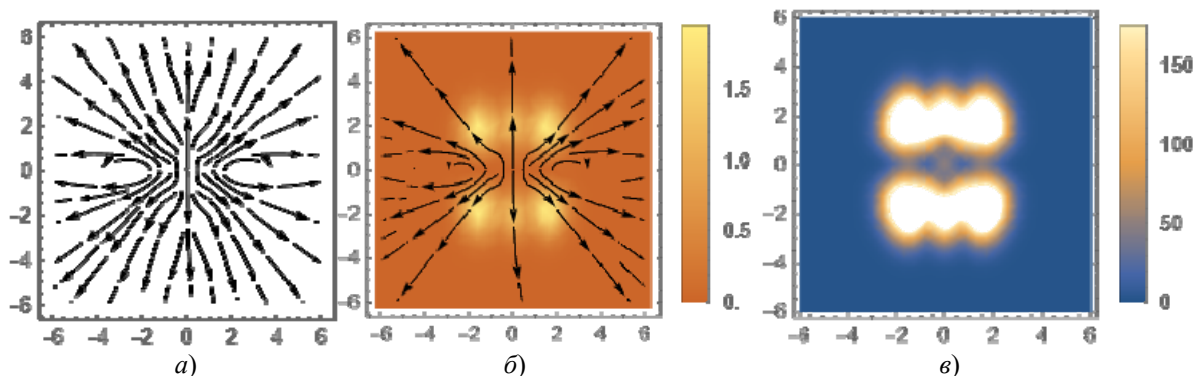


Рисунок 2.3 – Общий поперечный поток энергии и интенсивность векторных пучков Эрмита – Гаусса (элегантных ТМ-ее мод): а) линии поперечного потока в поперечном сечении XOY ; б) линии поперечного потока вместе с его интенсивностью; в) полная интенсивность пучка в поперечном сечении XOY . Используемые параметры: $Q''_{0x} = 0,8$; $Q''_{0y} = 0,3$; $P''_{0x} \rightarrow \infty$; $P''_{0y} \rightarrow \infty$

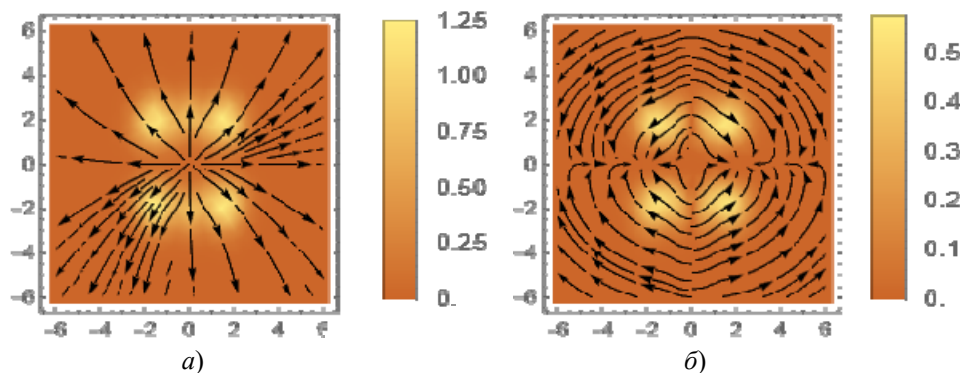


Рисунок 2.4 – Поперечные потоки энергии вместе с их интенсивностями векторных пучков Эрмита – Гаусса (элегантных ТМ-ее мод): а) линии плотности поперечного орбитального S_o потока в поперечном сечении XOY ; б) линии плотности поперечного спинового S_s потока вместе с его интенсивностью. Используемые параметры, как на рисунке 2.3

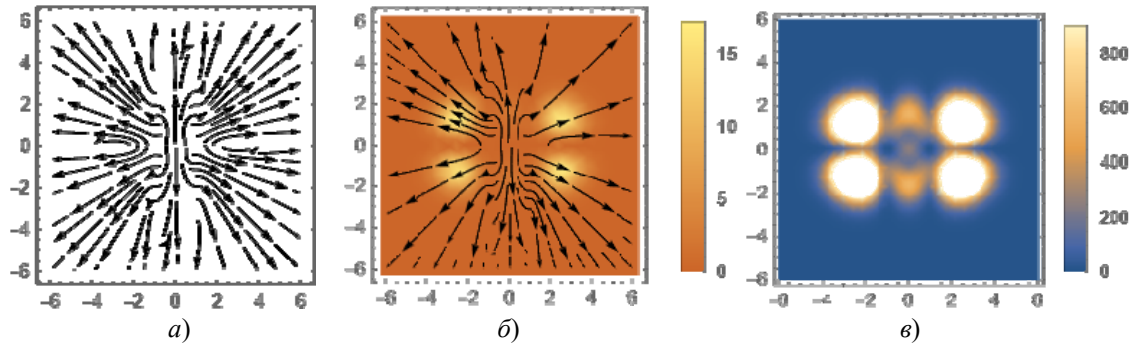


Рисунок 2.5 – Поперечный поток энергии и интенсивность векторных пучков Эрмита – Гаусса (стандартных ТМ-ss мод): а) линии поперечного потока в поперечном сечении XOY ; б) линии поперечного потока вместе с его интенсивностью; в) полная интенсивность пучка в поперечном сечении XOY . Используемые параметры: $Q''_{0x} = 0,3$; $Q''_{0y} = 0,5$; $P''_{0x} = -0,3$; $P''_{0y} = -0,5$

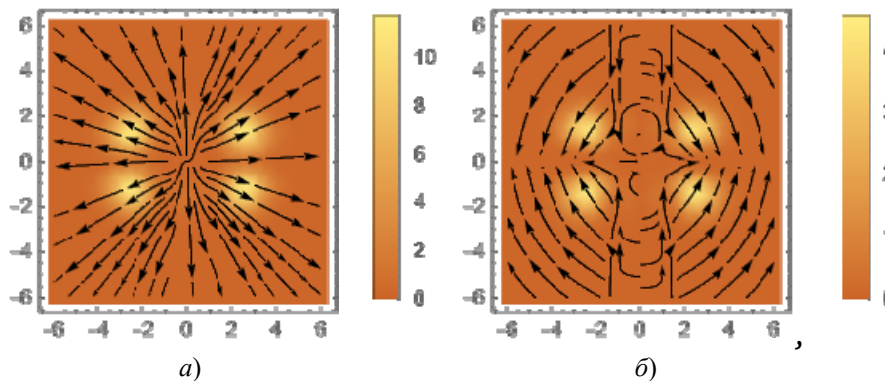


Рисунок 2.6 – Поперечные потоки энергии вместе с их интенсивностями векторных пучков Эрмита – Гаусса (стандартных ТМ-ss мод): а) линии плотности поперечного орбитального S_o потока в поперечном сечении XOY ; б) линии плотности поперечного спинного S_s потока вместе с его интенсивностью. Используемые параметры, как на рисунке 2.5

Заключение

В данной работе представлены новые решения векторного параболического уравнения, описывающие параксиальные векторные 3D световые пучки Эрмита – Гаусса с неоднородной поляризацией (ТМ-моды). Указано, что имеются шесть типов таких пучков, обозначаемые индексами gg, gs, ge, sg, se, ee . Установлено, что условия физической реализуемости ТМ-мод Эрмита – Гаусса всех типов одинаковы и сводятся к ограничениям на мнимые части параметров Q_{0x} и Q_{0y} : $Q''_{0x} > 0 \cup Q''_{0y} > 0$. При этом вещественные части свободных параметров Q_{0x} и Q_{0y} не изменяют ограничений КИ. Представлены явные выражения для векторов поля для интенсивности, орбитального, спинного и общего потоков энергии ТМ мод различных типов.

Проведенное графическое моделирование эллипсов поляризации, интенсивности и поперечных потоков энергии (орбитального S_o , спинного S_s и общего $S_{\perp} = S_o + S_s$) потоков подтвердило и проиллюстрировало аналитические расчеты.

Наличие нескольких свободных параметров позволяет в широких пределах изменять физические свойства исследуемых световых пучков, это открывает интересные перспективы их дальнейшего изучения и использования.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ананьев, Ю.А.* Оптические резонаторы и лазерные пучки / Ю.А. Ананьев. – Москва: Наука, 1990. – 264 с.
2. *Гончаренко, А.М.* Гауссовы пучки света / А.М. Гончаренко. – Минск: Наука и техника, 1977. – 142 с.
3. *Гиргель, С.С.* Скалярные параксиальные двумерные гауссовоподобные пучки / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2010. – № 1 (2). – С. 7–11.
4. *Гиргель, С.С.* Физические свойства скалярных 2D пучков Куммера – Гаусса / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2011. – № 4 (9). – С. 19–23.
5. *Гиргель, С.С.* Пучки Куммера без гауссовой аподизации с переносимой конечной мощностью // Проблемы физики, математики и техники. – 2015. – № 3 (24). – С. 7–9.

6. Гиргель, С.С. Свойства векторных параксиальных световых пучков. I. Однородная поляризация / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2011. – № 1 (6). – С. 20–24.
7. Гиргель, С.С. Поляризационные и энергетические свойства векторных гауссовоподобных пучков. I. Однородная поляризация / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2016. – № 1 (26). – С. 17–21.
8. Гиргель, С.С. Поляризационные и энергетические свойства векторных гауссовоподобных пучков. II. Неоднородная поляризация / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2017. – № 4 (33). – С. 7–10.
9. Berry, M.V. Optical currents / M.V. Berry // Journal of Optics A: Pure and Applied Optics. – 2009. – Vol. 11 (9). – P. 094001.
10. 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.
11. 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.
12. Bandres, M.A. Vector Helmholtz – Gauss and vector Laplace – Gauss beams / M.A. Bandres, J.C. Gutierrez-Vega // Optics Letters. – 2005. – Vol. 30, № 16. – P. 2155–2057.
13. Fadeyeva, T.A. Singular beams with transverse electric and transverse magnetic fields / T.A. Fadeyeva // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2013. – Vol. 16, iss. 1. – P. 55–58.
14. Volke-Sepulveda, Karen. General construction and connections of vector propagation invariant optical fields: TE and TM modes and polarization states / Karen Volke-Sepulveda, Eugenic Ley-Koo // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 2006. – Vol. 8. – P. 867–877.
15. Гиргель, С.С. Энергетические характеристики векторных циркулярных пучков Куммера конечной мощности. II. Неоднородная поляризация / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 1 (54) – С. 20–24.
16. Гиргель, С.С. Поляризационные свойства и поперечные потоки энергии векторных бессель-гауссовых ТМ световых пучков / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 2 (55). – С. 15–19.
17. Федоров, Ф.И. Оптика анизотропных сред / Ф.И. Федоров. – Минск: Изд-во АН БССР, 1976. – 380 с.

Поступила в редакцию 26.04.2023.

Информация об авторах

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

ПРИВЕДЕННЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ В ТЕОРИИ РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ

Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

REDUCED THERMODYNAMIC COEFFICIENTS IN THE THEORY OF REAL GASES

E.A. Dey, G.Yu. Tyumenkov

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. На основании использования уравнений состояния реальных газов получены аналитические выражения для их физических параметров (термодинамических коэффициентов), выраженных в приведенных переменных. Рассмотрены уравнения Пенга – Робинсона, Исикавы – Чанга – Лу и Фогельсона – Лихачева.

Ключевые слова: термодинамический коэффициент, приведенные переменные, уравнение состояния реального газа, уравнение Пенга – Робинсона, уравнение Исикавы – Чанга – Лу, уравнение Фогельсона – Лихачева.

Для цитирования: Дей, Е.А. Приведенные термодинамические коэффициенты в теории реальных газов / Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 20–24. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_20. – EDN: CPVAEW

Abstract. Based on the use of equations of state of real gases, analytical expressions for their physical parameters (thermodynamic coefficients) expressed in the reduced variables are obtained. The Peng – Robinson equation, Ishikawa – Chung – Lu equation and Fogelson – Likhachev equation are considered.

Keywords: thermodynamic coefficient, reduced variables, real gas equation of state, Peng – Robinson equation, Ishikawa – Chung – Lu equation, Vogelson – Likhachev equation.

For citation: Dey, E.A. Reduced thermodynamic coefficients in the theory of real gases / E.A. Dey, G.Yu. Tyumenkov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 20–24. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_20 (in Russian). – EDN: CPVAEW

Введение

Безразмерные приведенные термодинамические переменные основаны на использовании в качестве единиц измерения объема V , температуры T и давления P реального газа соответственно критической температуры $T_{кр}$, критического давления $P_{кр}$ и критического объема $V_{кр}$

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

Определение и использование этих переменных для записи уравнений состояния в приведенной форме содержатся практически во всех учебниках по термодинамике [1], [2]. На этой основе сформулирован принцип соответственных состояний, согласно которому вещества, имеющие одинаковые приведенные термодинамические параметры состояния, имеют и одинаковые свойства.

В работе [3] были введены определения приведенного изобарного коэффициента объемного расширения $\tilde{\alpha}_p$, приведенного изохорного термического коэффициента давления $\tilde{\beta}_V$, приведенной изотермической сжимаемости \tilde{k}_T и

приведенной разности изобарной и изохорной теплоемкостей $\Delta\tilde{c}$

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_p &= \frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{P}} = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}; \\ \tilde{\beta}_V &= \frac{1}{\tilde{P}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}}; \quad \tilde{k}_T = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{P}} \right)_{\tilde{T}} = -\frac{1}{\tilde{V}} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}; \\ \Delta\tilde{c} &= -\tilde{T} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}}^2 \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}} \right)_{\tilde{T}}^{-1}. \end{aligned} \quad (0.2)$$

Соответственно, связь приведенных коэффициентов с экспериментально измеряемыми физическими параметрами газов задается соотношениями

$$\begin{aligned} \alpha_p &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{T_{кр}} \tilde{\alpha}_p; \quad \beta_V = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{T_{кр}} \tilde{\beta}_V; \\ k_T &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{P_{кр}} \tilde{k}_T; \quad \Delta c = \frac{P_{кр} V_{кр}}{T_{кр}} \Delta\tilde{c}. \end{aligned}$$

Несложно убедиться в выполнении соотношений

$$\tilde{\alpha}_p = \tilde{\beta}_V \tilde{k}_T \tilde{P}; \quad \Delta\tilde{c} = \tilde{P} \tilde{V} \tilde{T} \tilde{\alpha}_p \tilde{\beta}_V \quad (0.3)$$

для рассматриваемых приведенных характеристик реальных газов.

На основе (0.2) в [3] были получены выражения для приведенных термодинамических коэффициентов и приведенной разности изобарной и изохорной теплоемкостей реальных газов в рамках уравнений состояния Ван-дер-Ваальса [1], [2], Редлиха – Квонга [4] и Соаве – Редлиха – Квонга [5].

В уравнении Соаве – Редлиха – Квонга впервые был введен параметр $a(\tilde{T})$, зависящий от приведенной безразмерной температуры. В дальнейшем эта идея получила позитивное развитие в уравнении Пенга – Робинсона [6], [7] и других. Более того, температурная зависимость была распространена и на параметр $b(\tilde{T})$, что успешно реализовано в уравнении Исикавы – Чанга – Лу [8], [9].

Данная работа является продолжением работы [3] и посвящена получению аналогичных результатов на основе уравнений Пенга – Робинсона, Исикавы – Чанга – Лу и Фогельсона – Лихачева [10].

Предполагается, что вводимые далее вспомогательные обозначения действуют в пределах раздела, посвященного отдельному уравнению состояния.

1 Приведенные формы термодинамических коэффициентов и разности изобарной и изохорной теплоемкостей в модели Пенга – Робинсона

Уравнение состояния Пенга – Робинсона широко используется в теории и имеет высокую прикладную значимость в технологии нефтегазодобычи, криогенике и ряде других областей. Молярная форма уравнения имеет вид [6]

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a(T)}{V(V+b)+b(V-b)}. \quad (1.1)$$

Параметр b является постоянным, а параметр $a(T)$ зависит от приведенной температуры

$$a(T) = a_c \alpha(\tilde{T});$$

$$\alpha(\tilde{T}) = \left[1 + k \left(1 - \sqrt{\tilde{T}} \right) \right]^2; \quad \alpha(1) = 1. \quad (1.2)$$

Здесь, в соответствии с [6], коэффициент $k = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2$ содержит параметр ω – ацентрический фактор Питцера. Для конкретного газа это есть фиксированное число и поэтому не рассматривается как переменная величина.

Следует отметить, что явный вид $\alpha(\tilde{T})$ в последние годы активно используется как инструмент адаптации уравнения состояния к более детальному описанию свойств реальных газов. В связи с этим в литературе широко обсуждаются десятки модификаций этой функции [7], [11], [12]. По этой причине в получаемых формулах функции вида $\alpha(\tilde{T})$ рассматриваются в общем виде и не конкретизируются.

Параметры уравнения Пенга – Робинсона можно выразить через параметры критического состояния газа, для которого $\tilde{T} = 1$, $\alpha(1) = 1$ и должны выполняться условия

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T_{кр}} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_{T_{кр}} = 0. \quad (1.3)$$

Для этого удобно параметр b выразить через величину критического объема

$$V_{кр} = \varphi b. \quad (1.4)$$

Условия (1.3) позволяют получить соотношения между параметрами уравнения и параметрами критического состояния

$$b = \Omega_b \frac{RT_{кр}}{P_{кр}}; \quad a_c = \Omega_a \frac{R^2 T_{кр}^2}{P_{кр}} \quad (1.5)$$

где постоянные множители равны

$$\Omega_b = \frac{1}{3\varphi + 1} = 0,07779607;$$

$$\Omega_a = \frac{3\varphi^2 + 6\varphi + 5}{(3\varphi + 1)^2} = 0,45723553. \quad (1.6)$$

Введенный числовой параметр φ получается в результате решения кубического уравнения и имеет значение

$$\varphi = \sqrt[3]{4 + 2\sqrt{2}} + \sqrt[3]{4 - 2\sqrt{2}} + 1 = 3,95137304.$$

Критические параметры уравнения Пенга – Робинсона (см., например [13]), равны соответственно:

$$T_{кр} = \frac{a_c \Omega_b}{b \Omega_a R}; \quad P_{кр} = \frac{a_c \Omega_b^2}{b^2 \Omega_a}. \quad (1.7)$$

Критический коэффициент сжимаемости для газов Пенга – Робинсона имеет значение, более близкое к экспериментальным значениям реальных газов, чем для уравнения Ван-дер-Ваальса

$$Z_{кр} = \frac{P_{кр} V_{кр}}{RT_{кр}} = 0,3074.$$

Для упрощения последующих выкладок введем новые константы

$$\sigma_1 = \frac{1}{\Omega_b} = 12,85411911,$$

$$\sigma_2 = \frac{\Omega_a}{\Omega_b^2} = 75,54828481. \quad (1.8)$$

Подставляя (1.4)–(1.8) в (1.1), получим приведенную форму уравнения Пенга – Робинсона

$$\tilde{P} = \frac{\sigma_1 \tilde{T}}{(\varphi \tilde{V} - 1)} - \frac{\sigma_2 \alpha(\tilde{T})}{\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1}. \quad (1.9)$$

Выражения (1.6) и (1.7) позволяют найти фигурирующие в (0.1) частные производные

$$\left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\tilde{V}} = \frac{\sigma_1}{(\varphi \tilde{V} - 1)} - \frac{\sigma_2 \alpha'(\tilde{T})}{\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1};$$

$$\alpha'(\tilde{T}) = \frac{d}{d\tilde{T}} \alpha(\tilde{T});$$

$$\left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{V}}\right)_{\tilde{T}} = -\frac{\varphi \sigma_1 \tilde{T}}{(\varphi \tilde{V} - 1)^2} + \frac{2\varphi \sigma_2 (\varphi \tilde{V} + 1) \alpha(\tilde{T})}{(\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1)^2}. \quad (1.10)$$

С учетом предложенных к настоящему времени весьма многочисленных модификаций функции $\alpha(\tilde{T})$ явный расчет ее производной на основании только представления (1.2) не является целесообразным.

Производные (1.10) и уравнение (1.9), в свою очередь, дают явный вид термодинамических характеристик (0.2), удобный для организации вычислений, например

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{1 - \frac{\sigma_2 (\varphi \tilde{V} - 1) \alpha'(\tilde{T})}{\sigma_1 (\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1)}}{\tilde{T} - \frac{\sigma_2 (\varphi \tilde{V} - 1) \alpha(\tilde{T})}{\sigma_1 (\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1)}}.$$

В полученном выражении повторяющиеся элементы формул определим как самостоятельные функции

$$A(\tilde{V}) = \frac{\sigma_2 (\varphi \tilde{V} - 1)}{\sigma_1 (\varphi^2 \tilde{V}^2 + 2\varphi \tilde{V} - 1)};$$

$$B(\tilde{V}) = \frac{2\sigma_1}{\sigma_2} (\varphi \tilde{V} + 1).$$

Тогда получаем компактные выражения для рассматриваемых термодинамических параметров

$$\tilde{\beta}_V(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{1 - A(\tilde{V})\alpha'(\tilde{T})}{\tilde{T} - A(\tilde{V})\alpha(\tilde{T})};$$

$$\tilde{\alpha}_P(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{(\varphi \tilde{V} - 1) [1 - A(\tilde{V})\alpha'(\tilde{T})]}{\varphi \tilde{V} [\tilde{T} - A^2(\tilde{V})B(\tilde{V})\alpha(\tilde{T})]};$$

$$\tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{(\varphi \tilde{V} - 1)^2}{\sigma_1 \varphi \tilde{V} [\tilde{T} - A^2(\tilde{V})B(\tilde{V})\alpha(\tilde{T})]}.$$

Несложно убедиться в выполнении первого соотношения (0.4) для полученных коэффициентов.

Значение $\Delta \tilde{c}$ получим на основании второго соотношения (0.3)

$$\Delta \tilde{c} = \frac{\sigma_1 \tilde{T} [1 - A(\tilde{V})\alpha'(\tilde{T})]^2}{\varphi [\tilde{T} - A^2(\tilde{V})B(\tilde{V})\alpha(\tilde{T})]}.$$

2 Приведенные формы термодинамических коэффициентов и разности изобарной и изохорной теплоемкостей в модели Исикавы – Чанга – Лу

Как отмечено выше, использование температурно-зависимых параметров получило дальнейшее развитие в работах Т. Исикавы, У.К. Чанга и Б. Лу [8], [9], в которых было предложено уравнение состояния с двумя температурно-зависимыми параметрами. Молярная форма этого уравнения записывается как

$$P = \frac{RT(2V + b(T))}{V(2V - b(T))} - \frac{a(T)}{\sqrt{TV}(V + b(T))} \quad (2.1)$$

с параметрами, имеющими структуру

$$a(T) = \Omega_a \alpha(\tilde{T}) \frac{R^2 T_k^{5/2}}{P_k}, \quad b(T) = \Omega_b \beta(\tilde{T}) \frac{RT_k}{P_k},$$

$$\alpha(1) = \beta(1) = 1.$$

Функции $\alpha(\tilde{T})$, $\beta(\tilde{T})$ в работе [8] рассматривались в виде полиномов

$$\alpha(\tilde{T}) = \sum_{k=0}^3 a_k \tilde{T}^k, \quad \beta(\tilde{T}) = \sum_{k=0}^3 b_k \tilde{T}^k,$$

коэффициенты которых для каждого вещества подбирались по критерию наилучшего совпадения с экспериментальными данными, например, о теплоте парообразования. При этом приведенная температура изменялась в пределах $0,6 \leq \tilde{T} \leq 1,6$. В работе [9] при описании свойств газа в сверхкритической области зависимость параметров от приведенной температуры была иной

$$\alpha(\tilde{T}) = \sum_{k=0}^2 c_k \tilde{T}^{-k}, \quad \beta(\tilde{T}) = \sum_{k=0}^2 d_k \tilde{T}^{-k}.$$

Таким образом, уравнение Исикавы – Чанга – Лу предполагает определенную свободу формы для $\alpha(\tilde{T})$ и $\beta(\tilde{T})$ в зависимости от исследуемой физической ситуации.

Параметры критического состояния связаны с параметрами уравнения (2.1) соотношениями [14]

$$V_{kp} = \chi b(T_{kp}),$$

$$T_{kp} = \sigma^2 \left(\frac{a(T_{kp})}{b(T_{kp}) R} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad P_{kp} = \varphi \left(\frac{a(T_{kp})^2 R}{b(T_{kp})^5} \right)^{\frac{1}{3}},$$

где использованы обозначения для коэффициентов

$$\chi = 2,89812, \quad \sigma = \frac{2\chi - 1}{2\chi + 2} = 0,61520,$$

$$\varphi = \frac{3}{(\chi + 1)^2 (2\chi - 1)} = 0,04116,$$

$$\Omega_a = \frac{8(\chi + 1)^3}{3(6\chi + 1)^2} = 0,46712, \quad \Omega_b = \frac{2}{6\chi + 1} = 0,10876.$$

В приведенных переменных уравнение Исикавы – Чанга – Лу принимает вид [14]

$$\tilde{P} = \frac{\tilde{T}(2\chi \tilde{V} + \beta(\tilde{T}))}{\Omega_b \chi \tilde{V} (2\chi \tilde{V} - \beta(\tilde{T}))} - \frac{\Omega_a \alpha(\tilde{T})}{\Omega_b^2 \sqrt{\tilde{T}} \chi \tilde{V} (\chi \tilde{V} + \beta(\tilde{T}))}. \quad (2.2)$$

Введём ряд дополнительных обозначений

$$\alpha_1(\tilde{T}) = \frac{\alpha(\tilde{T})}{\sqrt{\tilde{T}}}; \quad \alpha'_1(\tilde{T}) = \frac{d}{d\tilde{T}} \left(\frac{\alpha(\tilde{T})}{\sqrt{\tilde{T}}} \right) =$$

$$= \frac{\alpha'(\tilde{T})}{\sqrt{\tilde{T}}} - \frac{\alpha(\tilde{T})}{2\tilde{T}^{3/2}} = \frac{\alpha'(\tilde{T})}{\sqrt{\tilde{T}}} - \frac{\alpha_1(\tilde{T})}{2\tilde{T}};$$

$$A(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{2\chi \tilde{V} + \beta(\tilde{T})}{\Omega_b \chi \tilde{V}^2 (2\chi \tilde{V} - \beta(\tilde{T}))};$$

$$B(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{\Omega_a}{\Omega_b^2 \chi \tilde{V} (\chi \tilde{V} + \beta(\tilde{T}))^2};$$

$$C(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{4}{\Omega_b (2\chi \tilde{V} - \beta(\tilde{T}))^2}.$$

Тогда уравнение (2.2) принимает вид

$$\tilde{P} = \tilde{V}\tilde{T}A(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1(\tilde{T})(\chi\tilde{V} + \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T}). \quad (2.3)$$

Далее на основе (2.3) и (0.2) получаем явный вид искомых термодинамических коэффициентов и разности теплоёмкостей в приведенной форме:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) &= (\tilde{V}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \tilde{T}\tilde{B}'(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1'(\tilde{T})(\chi\tilde{V} + \\ &+ \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T}) + \alpha_1(\tilde{T})\beta'(\tilde{T})B(\tilde{V}, \tilde{T})) / (\tilde{V}\tilde{T}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \\ &+ \tilde{T}\beta(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1(\tilde{T})(2\chi\tilde{V} + \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T})); \\ \tilde{\beta}_v(\tilde{V}, \tilde{T}) &= (\tilde{V}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \tilde{T}\tilde{B}'(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1'(\tilde{T})(\chi\tilde{V} + \\ &+ \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T}) + \alpha_1(\tilde{T})\beta'(\tilde{T})B(\tilde{V}, \tilde{T})) / (\tilde{V}\tilde{T}A(\tilde{V}, \tilde{T}) - \\ &- \alpha_1(\tilde{T})(\chi\tilde{V} + \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T})); \\ \tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) &= (\tilde{V}\tilde{T}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \tilde{T}\tilde{B}'(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \\ &- \alpha_1(\tilde{T})(2\chi\tilde{V} + \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T}))^{-1}; \\ \Delta\tilde{c} &= \tilde{V}\tilde{T}[\tilde{V}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \tilde{T}\tilde{B}'(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1'(\tilde{T})(\chi\tilde{V} + \\ &+ \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T}) + \alpha_1(\tilde{T})\beta'(\tilde{T})B(\tilde{V}, \tilde{T})]^2 / (\tilde{V}\tilde{T}A(\tilde{V}, \tilde{T}) + \\ &+ \tilde{T}\beta(\tilde{T})C(\tilde{V}, \tilde{T}) - \alpha_1(\tilde{T})(2\chi\tilde{V} + \beta(\tilde{T}))B(\tilde{V}, \tilde{T})). \end{aligned}$$

3 Приведенные формы термодинамических коэффициентов и разности изобарной и изохорной теплоёмкостей в модели Фогельсона – Лихачева

В работе [10] было рассмотрено молярное уравнение состояния реального газа, содержащее пять параметров и имеющее смысл обобщения уравнения Ван-дер-Ваальса

$$\left(P + \frac{a}{(V+c)^k T^m}\right)(V-b) = RT. \quad (3.1)$$

Авторами работы [10] было показано, что уравнение хорошо передает количественные соотношения между параметрами реальных газов. Рассчитанные путем обработки табличных данных для значений P, V, T критические параметры большинства газов оказались близкими по величине к экспериментальным параметрам.

Частными случаями уравнения (3.1) оказываются [1], [2], [10]: уравнение Ван-дер-Ваальса ($c=0, k=2, m=0$), уравнение Бертло ($c=0, k=2, m=1$), уравнение Клаузиуса ($k=2, m=1$).

В работе [15] для уравнения (3.1) получена форма записи в приведенных переменных и изучено поведение инверсионной кривой эффекта Джоуля – Томсона.

Характеристики критического состояния могут быть выражены через параметры уравнения состояния:

$$\begin{aligned} V_{kp} &= \frac{(k+1)b + 2c}{k-1}; \quad P_{kp} = \frac{RT_{kp}(k-1)^2}{4k(b+c)}; \\ T_{kp}^{m+1} &= \frac{4ka(k-1)^{k-1}}{R(k+1)^{k+1}(b+c)^{k-1}}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Из выражений (3.2) несложно получить формулы, связывающие значения некоторых параметров уравнения состояния

$$\begin{aligned} a &= \frac{(k+1)^{k+1}(b+c)^{k-1}}{4k(k-1)^{k-1}} RT_{kp}^{m+1}; \quad b+c = \frac{(k-1)^2}{4k} \frac{RT_{kp}}{P_{kp}}; \\ (k+1)(V_{kp}-b) &= 2(V_{kp}+c). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Из (3.3) следует, в частности, что параметры a, b и c для уравнения, корректно описывающего критическое состояние вещества, не являются независимыми.

В приведенных переменных (0.1) уравнение (3.1) принимает вид, соответствующий исходному

$$\left[\tilde{P} + \frac{A}{(\tilde{V} + \tilde{c})^k \tilde{T}^m}\right](\tilde{V} - \tilde{b}) = B\tilde{T}, \quad (3.4)$$

где использованы обозначения

$$\begin{aligned} \tilde{b} &= \frac{b}{V_{kp}}, \quad \tilde{c} = \frac{c}{V_{kp}}; \\ A &= \frac{(k+1)(1+\tilde{c})^k}{(k-1)}, \quad B = \frac{4k(1+\tilde{c})}{k^2-1}. \end{aligned}$$

Тогда критический коэффициент сжимаемости газа Фогельсона – Лихачева определяется выражением

$$Z_{kp} = \frac{P_{kp} V_{kp}}{RT_{kp}} = \frac{k^2-1}{4k(1+\tilde{c})}.$$

При нахождении аналитических выражений для частных производных, входящих в (0.2), и далее для приведенных термодинамических коэффициентов, будем использовать вспомогательную функцию

$$D(\tilde{V}, \tilde{T}) = \frac{A(\tilde{V} - \tilde{b})}{B\tilde{T}^{m+1}(\tilde{V} + \tilde{c})^k}.$$

Тогда уравнение (3.4) принимает вид

$$\tilde{P} = \frac{B\tilde{T}}{(\tilde{V} - \tilde{b})} [1 - D(\tilde{V}, \tilde{T})].$$

С учетом введенных обозначений получаем явный вид искомых термодинамических коэффициентов и разности теплоёмкостей в приведенной форме, определяемых уравнением состояния Фогельсона – Лихачева

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}_v(\tilde{V}, \tilde{T}) &= \frac{1+mD(\tilde{V}, \tilde{T})}{\tilde{T}[1-D(\tilde{V}, \tilde{T})]}; \\ \tilde{\alpha}_p(\tilde{V}, \tilde{T}) &= \frac{(\tilde{V} + \tilde{c})(\tilde{V} - \tilde{b})[1+mD(\tilde{V}, \tilde{T})]}{\tilde{V}\tilde{T}[\tilde{V} + \tilde{c} - k(\tilde{V} - \tilde{b})D(\tilde{V}, \tilde{T})]}; \\ \tilde{k}_T(\tilde{V}, \tilde{T}) &= \frac{(\tilde{V} - \tilde{b})^2(\tilde{V} + \tilde{c})}{B\tilde{V}\tilde{T}[\tilde{V} + \tilde{c} - k(\tilde{V} - \tilde{b})D(\tilde{V}, \tilde{T})]}; \\ \Delta\tilde{c} &= \frac{B(\tilde{V} + \tilde{c})[1+mD(\tilde{V}, \tilde{T})]^2}{\tilde{V} + \tilde{c} - k(\tilde{V} - \tilde{b})D(\tilde{V}, \tilde{T})}. \end{aligned}$$

На основании полученных результатов не сложно записать явные выражения для термодинамических коэффициентов и разности изобарной и изохорной теплоёмкостей, соответствующие частным случаям уравнения Фогельсона – Лихачева, а именно, уравнению Ван-дер-Ваальса, уравнению Бертло и уравнению Клаузиуса.

Заключение

Таким образом, в данной работе получены аналитические выражения для приведенного изобарного коэффициента объёмного расширения $\tilde{\alpha}_p$, приведенного изохорного термического коэффициента давления $\tilde{\beta}_p$, приведенной изотермической сжимаемости \tilde{k}_T и приведенной разности изобарной и изохорной теплоемкостей $\Delta\tilde{c}$ реальных газов, определяемые уравнениями состояния Пенга – Робинсона, Исикавы – Чанга – Лу и Фогельсона – Лихачева. Аналитические соотношения получены в удобной для проведения вычислений форме.

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. 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.
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. Lopez-Echeverry, J.S. Peng – Robinson equation of state: 40 years through cubics / J.S. Lopez-Echeverry, S. Reif-Acherman, E. Araujo-Lopez // Fluid Phase Equilibria. – 2017. – Vol. 447. – P. 39–71.

8. Ishikawa, T.A. Cubic Perturbed, Hard Sphere Equation of State for Thermodynamic Properties and Vapor-Liquid Equilibrium Calculations / T. Ishikawa, W.K. Chung, B.C.Y. Lu // AIChE Journal. – 1980. – Vol. 26. – P. 372–378.

9. Ishikawa, T. Simple and generalized Equation of State for Vapor– Liquid Equilibrium Calculations / T. Ishikawa, W.K. Chung, B.C.Y. Lu // Advances in Cryogenic Engineering. – 1980. – Vol. 25. – P. 671–681.

10. Фогельсон, Р.Л. Уравнение состояния реального газа. / Р.Л. Фогельсон, Е.П. Лихачев // ЖТФ. – 2004. – Т. 74, вып. 7. – С. 129–130.

11. Sun, X. New Alpha Functions for the Peng – Robinson Cubic Equation of State / X. Sun, Y. Fang, W. Zhao, S. Xiang // ACS Omega. – 2022. – Vol. 7 (6). – P. 5332–5339.

12. 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. 105–118.

13. Новикова, О.В. Анализ приведенных модификаций уравнения состояния Пенга – Робинсона в рамках процесса Джоуля – Томсона / О.В. Новикова, Г.Ю. Тюменков // Проблемы физики, математики и техники. – 2013. – № 3 (16). – С. 30–33.

14. Дей, Е.А. Свойства неидеального газа в модели Исикавы – Чанга – Лу / Е.А. Дей, Г.Ю. Тюменков // Проблемы физики, математики и техники. – 2017. – № 4 (33). – С. 11–16.

15. 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.

Поступила в редакцию 02.09.2023.

Информация об авторах

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

УДК 534.535

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_25
EDN: FFBNLF**ДВУХКООРДИНАТНАЯ АКУСТООПТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ
ОГРАНИЧЕННЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В КРИСТАЛЛАХ ПАРАТЕЛЛУРИТА****Г.В. Кулак¹, Т.В. Николаенко¹, Л.В. Цалко¹, П.И. Ропот²**¹Мозырский государственный педагогический университет им. И.П. Шамякина²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск**TWO-COORDINATE ACOUSTOOPTIC DIFFRACTION OF LIMITED LIGHT
BEAMS IN PARATELLURITE CRYSTALS****G.V. Kulak¹, T.V. Nikolaenko¹, L.V. Tsalko¹, P.I. Ropot²**¹I.P. Shamyakin Mozyr State Pedagogical University²B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk

Аннотация. Исследованы особенности акустооптической дифракции ограниченных световых пучков прямоугольного профиля на медленной сдвиговой ультразвуковой волне в кристаллах парателлурифта. Показано, что эффективность дифракции и ширина частотного пропускания акустооптического устройства в полярной плоскости значительно выше, чем в азимутальной. Установлено, что разрешающая способность устройства в режиме дефлектора может быть одинаковой для полярной и азимутальной плоскости за счет выбора размеров входной апертуры светового пучка.

Ключевые слова: акустооптическое взаимодействие, кристалл парателлурифта, ограниченный световой пучок, акустооптический дефлектор.

Для цитирования: Двухкоординатная акустооптическая дифракция ограниченных световых пучков в кристаллах парателлурифта / Г.В. Кулак, Т.В. Николаенко, Л.В. Цалко, П.И. Ропот // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 25–29. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_25. – EDN: FFBNLF

Abstract. The features of acoustooptical diffraction of limited light beams of a rectangular profile on a slow shear ultrasonic wave in paratellurite crystals were investigated. Diffraction efficiency and frequency transmission width of an acoustooptic device in polar plane are shown to be considerably higher than in azimuthal plane. It is established that the resolution of the device in the deflector mode can be the same for the polar and azimuthal planes due to the choice of the size of the input aperture of the light beam.

Keywords: acoustooptical interaction, paratellurite crystal, limited light beam, acoustooptical deflector.

For citation: Two-coordinate acoustooptic diffraction of limited light beams in paratellurite crystals / G.V. Kulak, T.V. Nikolaenko, L.V. Tsalko, P.I. Ropot // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 25–29. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_25 (in Russian). – EDN: FFBNLF

Введение

В одноосных кристаллах реализуется широкоапертурная геометрия взаимодействия света и ультразвука [1]–[4]. При этом плоскость акустооптического (АО) взаимодействия проходит через оптическую ось, а волновой вектор ультразвуковой (УЗ) волны составляет с перпендикуляром к оптической оси некоторый угол $\alpha \neq 0$. Такая геометрия АО взаимодействия имеет место, когда на диаграмме волновых векторов падающего и дифрагированного света касательные к волновым поверхностям параллельны. Другая геометрия АО взаимодействия реализуется в АО дефлекторах, когда волновой вектор ультразвука ортогонален волновому вектору дифрагированной световой волны [5]–[7]. При этом для светового пучка, падающего под углом Брэгга, в условиях анизотропной дифракции достигается высокая частотная ширина полосы пропускания

устройства на относительно низких УЗ частотах. Следует отметить, что АО взаимодействие в реальных условиях является, в общем случае, трехмерным [8], [9]. При этом для сильно расходящихся световых пучков необходимо учитывать особенности АО дифракции не только в полярной плоскости, но и ортогональной к ней азимутальной плоскости. При этом очевидно, что разрешающая способность и ширина полосы его пропускания в ортогональных плоскостях должны отличаться по величине.

В настоящей работе исследованы особенности анизотропной брэгговской АО дифракции светового пучка прямоугольного профиля на медленной сдвиговой УЗ волне в кристалле парателлурифта (TeO_2) в полярной плоскости ($\bar{1}10$) и азимутальной плоскости (001).

1 Теоретически результаты и их обсуждение

На рисунке 1.1 представлена схема АО взаимодействия в кристаллах парателлурита с учетом дифракции в полярной плоскости XZ ($X||[110]$, $Z||[001]$) и азимутальной плоскости XY ($X||[110]$, $Y||[\bar{1}10]$).

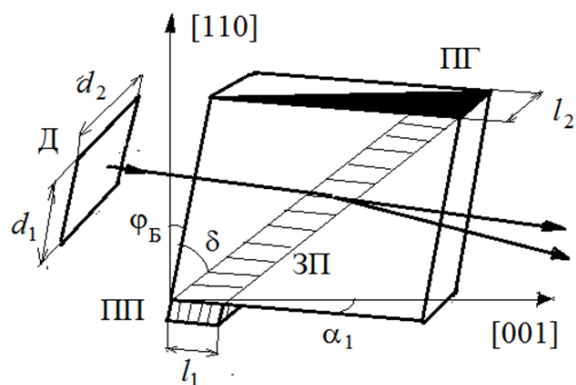


Рисунок 1.1 – Схема двухкоординатного АО модулятора-дефлектора на кристалле TeO_2 (ПП – пьезопреобразователь, ПГ – поглотитель, Д – диафрагма, ЗП – УЗ пучок, φ_B – угол Брэгга, δ – угол сноса групповой скорости УЗ волны, α_1 – угол отклонения волнового вектора УЗ волны от направления $[110]$ в кристалле; линейная апертура входного окна светового пучка (диафрагма) составила $d_1 \times d_2$; размер пьезопреобразователя составил $l_1 \times l_2$)

На рисунке 1.1 входное оптическое излучение падает на монокристалл TeO_2 перпендикулярно его входной грани. Апертура входного пучка имеет линейные размеры $d_1 \times d_2$. Бегущая УЗ волна возбуждается пьезопреобразователем (ПП) размером $l_1 \times l_2$. Длина АО взаимодействия l_d в полярной плоскости и фазовая скорость УЗ волны v даются соотношениями [3]:

$$\delta = \arctg \left\{ \left[c_{44} - \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \right] \sin \alpha_1 \frac{2 \cos^3 \alpha_1}{c_{11} - c_{12}} + c_{44} \sin^2 \alpha_1 \right\},$$

$$l_d = l_1 \left[1 - \frac{\cos(\delta)}{\sin(\delta - \varphi_1)} \right],$$

$$v = \left[\frac{0,5(c_{11} - c_{12}) \cos^2 \alpha_1 + c_{44} \sin^2 \alpha_1}{\rho} \right]^{1/2},$$

где l_1 – размер пьезопреобразователя в плоскости АО взаимодействия XZ , δ – угол сноса групповой скорости УЗ пучка по отношению к фазовой, φ_1 – угол падения оптического излучения по отношению к оси X (в полярной плоскости), ρ – плотность кристалла; c_{11} , c_{12} , c_{44} – упругие постоянные TeO_2 .

Будем считать, что падающая волна имеет необыкновенную «e» поляризацию, тогда дифрагированная волна имеет обыкновенную «o» поляризацию (рисунок 1.2). В таком случае дифракция света на ультразвуке имеет объемный характер. Условия пространственного и временного синхронизма позволяют установить соотношения между углами падения и дифракции в полярной плоскости XZ и азимутальной плоскости XY [2]. При этом эффективные фотоупругие постоянные, ответственные за процесс дифракционного рассеяния в полярной и азимутальной плоскостях, значительно различаются. Различаются также и величины расстройки фазового синхронизма. Следует отметить, что при анализе дифракционного процесса следует рассмотреть энергетические характеристики световых пучков в условиях объемной АО дифракции [1].

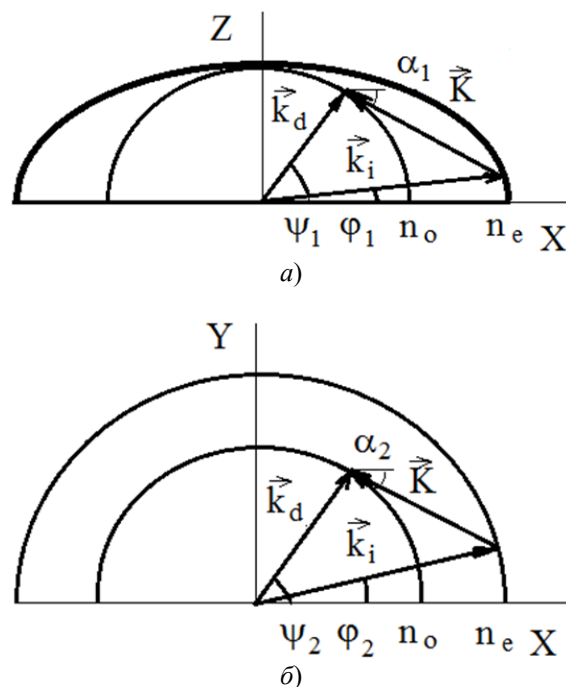


Рисунок 1.2 – Диаграмма волновых векторов в полярной (а) и азимутальной (б) плоскости: Z – оптическая ось кристалла, n_o , (n_e) – обыкновенный (необыкновенный) показатели преломления кристалла, φ_1 – угол падения в полярной плоскости (отсчитывается от оси X), ψ_1 – угол дифракции в полярной плоскости, α_1 – угол ориентации волнового вектора ультразвука по отношению к оси X в полярной плоскости, φ_2 – угол падения в азимутальной плоскости, ψ_2 – угол дифракции в азимутальной плоскости, α_2 – угол ориентации волнового вектора ультразвука по отношению к оси X в азимутальной плоскости

В соответствии с результатами работы [2] в полярной плоскости XZ угол падения света φ_1 находится из соотношения:

$$\varphi_1 = \operatorname{arccotg} \left(\frac{n_e}{n_o \sqrt{\eta \sin \alpha_1 + \cos \alpha_1}} \right),$$

где $\eta = \lambda f / n_o v$ ($v(f)$ – фазовая скорость (центральной частота) УЗ волны, λ – длина световой волны). Угол дифракции $\psi_1 = 90^\circ - \alpha_1$. Отстройка фазового синхронизма имеет вид:

$$\Delta k_1 = \left(-\frac{2\pi n_o}{v} \right) \times$$

$$\times \left(\sqrt{(\xi(\varphi_1) - \eta)^2 + 2\eta \xi(\varphi_1)(1 - \cos(\varphi_1 - \alpha_1))} - 1 \right) \Delta f_1,$$

где $\xi(\theta_1) = \frac{n_e}{\sqrt{n_o^2 \cos^2 \theta_1 + n_e^2 \sin^2 \theta_1}}$, Δf_1 – ширина

полосы пропускания устройства в полярной плоскости.

Эффективность АО взаимодействия в полярной плоскости находим из соотношения:

$$\eta_\theta = \left| \frac{\chi_1 \sin \left(l_d \sqrt{\chi_1^2 + (\Delta k_1 / 2)^2} \right)}{\sqrt{\chi_1^2 + (\Delta k_1 / 2)^2}} \right| B_{BL1},$$

где постоянная связи (χ_1) дается соотношением

$$\chi_1 = \left(\frac{\pi n_o^3 p_{eff}^1}{\lambda \sin \theta_1 \sin \psi_1} \right) \sqrt{\frac{2P_a}{l_1 l_2 \rho v^3}},$$

причем P_a – мощности ультразвуковой волны $p_{eff}^1 = (p_{12} - p_{11}) - \frac{p_{44} \sin(2\alpha)}{8}$ – эффективная фотоупругая постоянная для АО рассеяния в полярной плоскости (p_{11}, p_{12}, p_{44} – фотоупругие постоянные [5]); параметр B_{BL1} обусловлен конечной апертурой входного окна устройства d_1 и находится из соотношения [1]:

$$B_{BL1} = \sin c^{-2} \left(\frac{\chi_1 l_d}{\pi} \right) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} \sin c^2 \bar{X} \sin c^2 \sqrt{\chi_1^2 l_d^2 + G_1^2 \bar{X}^2} d\bar{X},$$

где $G_1 = \lambda l_1 f / n_o d_1 v$ – параметр Гордона; здесь $\sin c(\bar{X}) = \sin(\pi \bar{X}) / (\pi \bar{X})$.

Угол падения светового пучка в азимутальной плоскости (рисунок 1.2, б)

$$\varphi_2 = \arccos \left[\frac{\eta \cos \alpha_1 \sin \alpha_2 + \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}{\xi(\varphi_1) \sin \varphi_1} \right],$$

где α_2 – угол, который волновой вектор УЗ волны составляет с осью X в азимутальной плоскости XY (рисунок 2, б); угол дифракции $\psi_2 = 90^\circ - \alpha_2$.

Отстройки фазового синхронизма (Δk_2) для азимутальной плоскости даются соотношением:

$$\Delta k_2 = -\frac{2\pi n_o}{v} \times$$

$$\times \left(\sqrt{(\xi(0) - \eta)^2 + 2\eta \xi(\theta_2)(1 - \cos(\theta_2 - \alpha_2))} - 1 \right) \Delta f_2,$$

где $\xi(0) = n_e / n_o$, Δf_2 – ширина полосы пропускания в азимутальной плоскости.

Эффективность дифракции для азимутальной плоскости определяем из соотношения:

$$\eta_\varphi = \left| \frac{\chi_2 \sin \left(l_d \sqrt{\chi_2^2 + (\Delta k_2 / 2)^2} \right)}{\sqrt{\chi_2^2 + (\Delta k_2 / 2)^2}} \right| B_{BL2},$$

где постоянная (χ_2) связи

$$\chi_2 = \left(\frac{\pi n_e n_o^2 p_{eff}^2}{\lambda \sin \theta_2 \sin \psi_2} \right) \sqrt{\frac{2P_a}{l_1 l_2 \rho v^3}},$$

причем

$$p_{eff}^2 = (p_{12} - p_{11}) \frac{\sin(2\alpha)}{2} + \frac{p_{44}}{4}.$$

Таким образом, для используемых на практике кристаллов TeO_2 выполняется соотношение: $p_{eff}^2 < p_{eff}^1$ [6]. Параметр B_{BL2} обусловлен конечной апертурой входного окна фильтра d_2 в азимутальной плоскости и находится из соотношения:

$$B_{BL2} = \sin c^{-2} \frac{\chi_2 l_2}{\pi} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} \sin c^2 \bar{X} \sin c^2 \sqrt{\chi_2^2 l_2^2 + G_2^2 \bar{X}^2} d\bar{X},$$

где $G_2 = \frac{\lambda l_2 f}{n_o d_2 v}$ – параметр Гордона в плоскости XY .

Коэффициенты B_{BL1} и B_{BL2} , входящие в выражения (1.1) и (1.2), учитывают ограниченность световых пучков, падающих на АО ячейку с прямоугольным профилем, то есть с апертурой $d_1 \times d_2$. Следует отметить, что параметрам Гордона $G_{1,2} \sim 1$ соответствует функционирование АО устройства в режиме модулятора света; при $G_{1,2} \ll 1$ – реализуется режим АО дефлектора, а при $G_{1,2} \gg 1$ имеет место режим визуализации УЗ полей [1]. Если положить: $d_1 = d_2 = 1$ см, $l_1 = l_2 = 0,5$ см, $\lambda = 0,63$ мкм, $v = 620$ м/с, $n_o = 2,25$, то параметр Гордона составляет $G_{1,2} \approx 0,022$. Такое устройство функционирует в режиме АО дефлектора.

2 Результаты расчетов

На рисунке 2.1 представлена зависимость эффективности дифракции $\eta_{\theta, \varphi}$ для дифракции в полярной плоскости (а) и азимутальной плоскости (б) от мощности ультразвука при различных углах наклона волнового вектора УЗ волны по отношению к направлению [110] в кристалле.

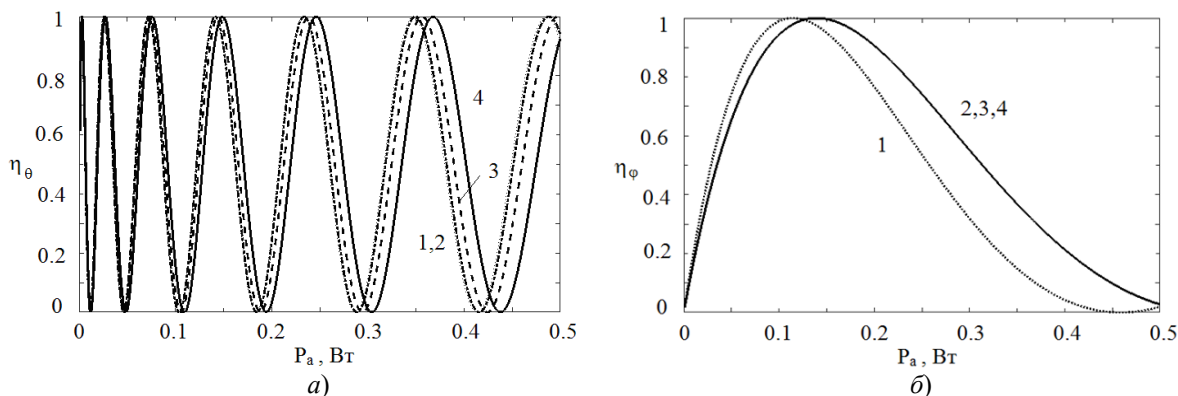


Рисунок 2.1 – Зависимость эффективности дифракции в полярной плоскости η_θ (а) и азимутальной плоскости η_ϕ (б) от акустической мощности при различных углах наклона $\alpha_{1,2}$: 3° (1), 4° (2), 5° (3), 6° (4) (кристалл TeO_2 , $n_o = 2,25$, $n_e = 2,41$, $\lambda = 0,63$ мкм, $d_1 = d_2 = 1$ см, $l_1 = l_2 = 0,5$ см)

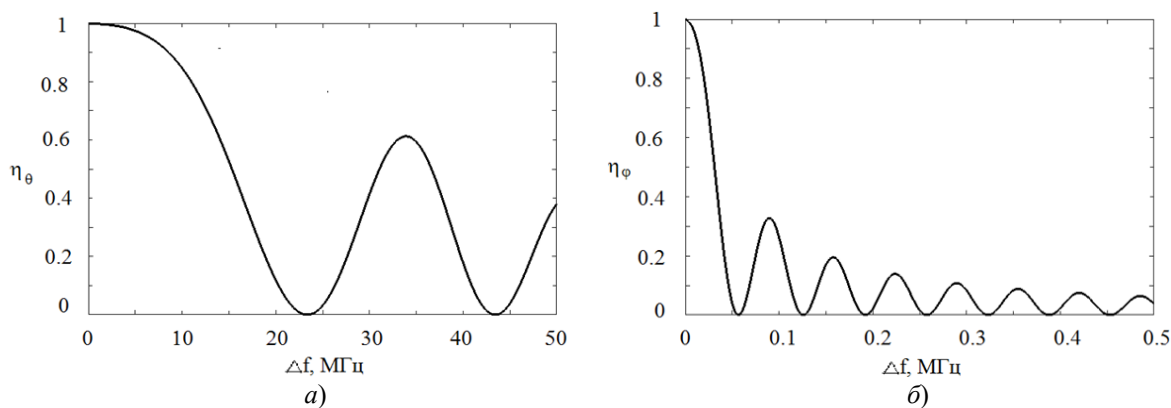


Рисунок 2.2 – Зависимость эффективности дифракции при АО взаимодействии в полярной η_θ (а) и азимутальной η_ϕ (б) плоскости от ширины полосы пропускания Δf (кристалл TeO_2 , $n_o = 2,25$, $n_e = 2,41$, $\lambda = 0,63$ мкм, $d_1 = d_2 = 1$ см, $l_1 = l_2 = 0,5$ см, $\alpha_{1,2} = 6^\circ$, максимальной эффективности дифракции $\eta_\theta \approx \eta_\phi \approx 1$ соответствует акустическая мощность $P_a = 0,16$ Вт).

Из рисунка 2.1 следует, что имеют место осциллирующие зависимости эффективности дифракции при увеличении мощности ультразвука [1]. Вследствие значительно меньшего значения эффективной фотоупругой постоянной для дифракции в азимутальной плоскости по сравнению с полярной, при дифракции в азимутальной плоскости максимальное значение дифракционной эффективности достигается при значительно больших акустических мощностях, чем при дифракции в полярной плоскости. При акустической мощности $P_a = 0,16$ Вт достигается примерно одинаковое значение дифракционной эффективности $\eta_\theta \approx \eta_\phi \approx 1$ для угла наклона $\alpha_{1,2} = 6^\circ$ [3], [4].

Зависимость эффективности дифракции $\eta_{\theta,\phi}$ от ширины полосы пропускания устройства Δf АО дефлектора при длине волны $\lambda = 0,63$ мкм для полярной (а) и азимутальной (б) плоскости дифракции представлены на рисунке 2.2.

Основными характеристиками АО дефлектора являются ширина полосы пропускания Δf и

число разрешимых положений дифрагированного пучка N . Ширина полосы пропускания АО дефлектора рассчитывалась по уровню 50% от максимального значения дифракционной эффективности (с учетом симметричной зависимости при $\Delta f_{1,2} > 0$ и $\Delta f_{1,2} < 0$) и составила $\Delta f_1 = 22$ МГц для АО дифракции в полярной плоскости и $\Delta f_2 = 0,08$ МГц – в азимутальной плоскости. Другой характеристикой АО дефлектора является число разрешимых положений соответственно в полярной и азимутальной плоскости, то есть $N_{\theta,\phi} = \tau_{1,2} \Delta f_{1,2}$, где $\tau_{1,2} = d_{1,2} / v$ – время прохода звукового пучка через световой пучок соответственно в полярной и азимутальной плоскости [1]. Следовательно, условие одинакового разрешения в полярной и азимутальной плоскостях ($N_\theta = N_\phi$) формулируется как: $\Delta f_1 / \Delta f_2 = d_2 / d_1$.

Заключение

Таким образом, эффективность брэгговской дифракции света на медленной сдвиговой ультразвуковой волне в кристалле парателлуриата

и ширина полосы частотной перестройки ультразвука в полярной ($\bar{1}10$) плоскости и азимутальной (001) плоскости значительно отличаются по величине. При определенных параметрах светового пучка прямоугольного профиля устройство может функционировать в режиме модуляции или дефлекции. Разрешающая способность устройства в режиме дефлектора может быть одинаковой для полярной и азимутальной плоскости за счет выбора размеров входной апертуры светового пучка.

ЛИТЕРАТУРА

1. Балакший, В.Н. Физические основы акустооптики / В.Н. Балакший, В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков. – Москва: Радио и связь, 1985. – 279 с.
2. Мачихин, А.С. Аберрации изображения в акустооптическом перестраиваемом фильтре / А.С. Мачихин, В.Э. Пожар // ЖТФ. – 2010. – Т. 80, В. 10. – С. 101–107.
3. Спектральное пропускание широкоапертурного брэгговского акустооптического фильтра на парателлурите / В.Б. Волошинов, Н.С. Казак, А.С. Лугина [и др.] // ЖПС. – 1990. – Т. 52, В. 2. – С. 284–289.
4. Зубринов, И.И. Широкополосный акустооптический фильтр / И.И. Зубринов, В.К. Сапожников, Д.В. Шелопут // ЖТФ. – 1997. – Т. 67, № 6. – С. 50–53.

5. Yano, T. TeO₂ anisotropic Bragg light deflector without midband degeneracy / T. Yano, Kawabuichi, A. Fukumoto, A. Watanabe // Appl. Phys. Letts. – 1975. – Vol. 26, № 12. – P. 689–691.

6. Warner, A.W. Acousto-optical light deflectors using optical activity in paratellurite / A.W. Warner, D.L. White, W.A. Bonner // J. Appl. Phys. – 1972. – Vol. 43, № 11. – P. 4489–4495.

7. Магдич, Л.Н. Акустооптические устройства и их применение / Л.Н. Магдич, В.Я. Молчанов. – Москва: Советское радио, 1978. – 111 с.

8. Балакший, В.И. Пространственная структура акустооптического фазового синхронизма в одноосных кристаллах / В.И. Балакший, Д.Е. Костюк // Оптика и спектроскопия. – 2006. – Т. 101, № 2. – С. 298–304.

9. Мачихин, А.С. Передача изображений при широкоугольном акустооптическом взаимодействии / А.С. Мачихин, В.Э. Пожар // Квантовая электроника. – 2010. – Т. 40, № 9. – С. 837–841.

Поступила в редакцию 05.07.2023.

Информация об авторах

Кулак Геннадий Владимирович – д.ф.-м.н., профессор
Николаенко Татьяна Викторовна – к.ф.-м.н., доцент
Цалко Людмила Васильевна – ст. преподаватель
Ропот Петр Иосифович – к.ф.-м.н., доцент

ВЛИЯНИЕ РАСПОЛОЖЕНИЯ ВОЛОКОН В ТРУБЕ ИЗ КОМПОЗИТА НА ПАРАМЕТРЫ ГИДРАВЛИЧЕСКОГО УДАРА

В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

INFLUENCE OF THE ARRANGEMENT OF FIBERS IN A COMPOSITE PIPE ON THE PARAMETERS OF WATER HAMMER

V.V. Mozharovsky, S.V. Kirhintsava

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Исследуется явление гидравлического удара в однослойной трубе из композита известным методом характеристик, с помощью которого представляется возможным определить напор (давление) и расход (скорость) движущейся жидкости [1]–[5]. Построена методика и создана программа в среде Delphi, позволяющая определять параметры гидроудара в трубе из композита (скорость волны, напор и расход жидкости). Проведен расчет и анализ результатов о влиянии физико-механических характеристик гидравлического удара на напор (давление) и расход жидкости на примере трубы из полиэтилена, усиленной обмоткой стальных волокон [4] с различными схемами армирования [6], [7]. Скорость волны жидкости в ортотропной трубе определялась по разработанной методике [8], показано, что полученные результаты хорошо согласуются с другими экспериментальными и теоретическими данными.

Ключевые слова: труба из композита, ортотропия, волокна, матрица, скорость волны, гидравлический удар, метод характеристик, напор, расход жидкости.

Для цитирования: Можаровский, В.В. Влияние расположения волокон в трубе из композита на параметры гидравлического удара / В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 30–35. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_30. – EDN: EAIFOC

Abstract. The phenomenon of water hammer in a single-layer composite pipe is investigated by the known method of characteristics, with which it is possible to determine the pressure and flow rate (velocity) of a moving fluid [1]–[5]. A methodology has been developed and a program has been created in the Delphi environment that makes it possible to determine the parameters of a water hammer in a composite pipe (wave velocity, pressure and fluid flow). The calculation and analysis of the results on the influence of the physico-mechanical characteristics of a water hammer on the head (pressure) and flow rate of the liquid is carried out on the example of a polyethylene pipe reinforced with a winding of steel fibers [4] with various reinforcement schemes [6], [7]. The velocity of the liquid wave in the orthotropic tube was determined according to the developed method [8], it is shown that the results obtained are in good agreement with the other experimental and theoretical data.

Keywords: composite pipe, orthotropy, fibers, matrix, wave velocity, water hammer, method of characteristics, pressure, fluid flow.

For citation: Mozharovsky, V.V. Influence of the arrangement of fibers in a composite pipe on the parameters of water hammer / V.V. Mozharovsky, S.V. Kirhintsava // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 30–35. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_30 (in Russian). – EDN: EAIFOC

Введение

Численное моделирование и прогнозирование внезапного повышения или понижения давления очень важны для защиты трубопроводов от нежелательных повреждений из-за эффекта гидроудара. Явление гидравлического удара было впервые обосновано в 1898 г. выдающимся российским учёным – Н. Е. Жуковским [1]. Одной из основных составляющих элементов этой проблемы является регулирование возможного максимального давления путем оптимальной эксплуатации, а также выбор надежных материалов и проектирование защитных устройств в трубопроводах. На современном этапе развития технологий такими материалами могут быть композиты. Скорость ударной волны является основным фактором в моделировании переходных

процессов, который может значительно изменять частоту и амплитуду волн гидроудара, а также экстремальные переходные распределения давления вдоль трубопровода. Скорость волны зависит от многих факторов, таких как плотность и модуль упругости жидкости, материала и формы трубы. Широко известны формулы для определения скорости ударных волн в однослойных изотропных трубах [2], однако они дают погрешности при применении для труб из композитных материалов. В работе [8] представлены зависимости, определяющие скорость волны жидкости в однослойных и двуслойных изотропных и ортотропных трубах. В данной статье на основе ранее предложенного подхода моделируются и сравниваются параметры гидравлического удара для однослойных труб с различными схемами

армирования. Результат показывает, что армирование может увеличить скорость ударной волны и вызвать дополнительные гидравлические скачки давления в трубопроводе, которые определяются с помощью математического моделирования.

1 Постановка задачи

В работе приводятся исследования о влиянии схем армирования однослойной трубы из композита (длиной L с внутренним и внешним радиусом r_a и r_c соответственно, и с протекающей внутри жидкостью плотностью ρ) волокнами с различной ориентацией (перпендикулярно, параллельно, радиально) на скорость волны, напор и расход жидкости при гидроударе. Решается задача компьютерной реализации определения напора и расхода жидкости при гидравлическом ударе для вышеуказанных труб из композитов методом характеристик.

2 Методика определения скорости волны и максимального давления при гидравлическом ударе

С помощью формул, предложенных известным российским ученым Н. Е. Жуковским, можно легко определять предельно возможное значение напора при гидравлическом ударе (прямой удар) [1]:

$$\Delta P = \pm \rho \cdot C \cdot V_0 \text{ или } \Delta H = \pm C \cdot V_0 / g, \quad (2.1)$$

где ΔP – ударное повышение давления; ρ – плотность перекачиваемой жидкости; C – скорость ударной волны; $g = 9,82 \text{ м/с}^2$ – ускорение свободного падения; H – пьезометрический напор; $V_0 = 4Q / (\pi D^2)$ – скорость жидкости в трубе, Q – расход жидкости, D – внутренний диаметр трубы.

Скорость ударной волны в однородных изотропных трубах определяется соотношением

$$C = \frac{1}{\sqrt{\frac{\rho}{K} + \rho \frac{D}{E\delta}}}, \quad (2.2)$$

где K – модуль объемной упругости жидкости, E – модуль упругости материала трубы; D – диаметр трубопровода, δ – толщина стенки трубопровода.

Для композитных труб скорость ударной волны определяется на основе теории упругости анизотропного тела. Так, в работе [8] выведены формулы, определяющие скорость волны при гидроударе для различных комбинаций слоистых упругих ортотропных свойств трубы и футеровки. Зависимость, определяющая скорость волны в однослойных ортотропных трубах [7], [8], будет

$$C = \sqrt{\frac{K / \rho}{1 + K \Omega}},$$

где

$$\Omega = \frac{-2}{1 - (r_c / r_a)^{2k}} \left(\frac{1}{A_{11}k + A_{12}} + \frac{(r_c / r_a)^{2k}}{A_{11}k - A_{12}} \right),$$

$$k = \sqrt{A_{22} / A_{11}},$$

$$A_{11} = \frac{E_r}{1 - \nu_{r0}\nu_{0r}}, A_{12} = \frac{\nu_{r0}E_0}{1 - \nu_{r0}\nu_{0r}}, A_{22} = \frac{E_0}{1 - \nu_{r0}\nu_{0r}},$$

r_c и r_a – внешний и внутренний радиусы трубы соответственно.

Механические свойства (модули упругости материала трубы E_0 , E_r и коэффициенты Пуассона ν_{0r} , ν_{r0} представлены в случае плоского напряженного состояния в цилиндрической системе координат $\theta r z$ и определяются по правилу «смесей» с объемным содержанием V волокна (индекс f) в матрице (индекс m) волокнистых материалов при различных способах расположения волокон определяются следующим образом [6], [7]:

– перпендикулярное расположение волокон по отношению к оси z :

$$E_r = E_m \frac{1 + \eta V}{1 - \eta V}, \quad \eta = \frac{E_f - E_m}{E_f + E_m},$$

$$E_0 = VE_f + (1 - V)E_m$$

$$\nu_{r0} = V\nu_f + (1 - V)\nu_m,$$

$$\nu_{0r} = \frac{E_0}{E_r}\nu_{r0};$$

– радиальное расположение волокон по отношению к оси z :

$$E_r = VE_f + (1 - V)E_m,$$

$$E_0 = E_m \frac{1 + \eta V}{1 - \eta V}, \quad \eta = \frac{E_f - E_m}{E_f + E_m}, \quad \nu_{r0} = \frac{E_r}{E_0}\nu_{0r},$$

$$\nu_{0r} = V\nu_f + (1 - V)\nu_m;$$

– параллельное расположение волокон по отношению к оси z :

$$E_r = VE_f + (1 - V)E_m,$$

$$E_0 = E_r, \quad \nu_{r0} = \nu_{0r},$$

$$\nu_{0r} = V\nu_f + (1 - V)\nu_m.$$

Если волокна расположены под определенным углом к осям, необходимо использовать зависимости из [9] с учетом угла армирования.

3 Описание уравнений гидравлического удара и метода характеристик

Уравнения непрерывности и импульса для одномерных потоков переходных процессов через закрытые трубопроводы выражаются гиперболическими уравнениями в частных производных [3]

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{C^2}{gA} \frac{\partial Q}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + gA \frac{\partial H}{\partial x} + RQ|Q| = 0.$$

Эти уравнения обычно решаются численно, преобразовав их в уравнения в частных производных по характеристическим линиям методом характеристик, рисунок 3.1 [3].

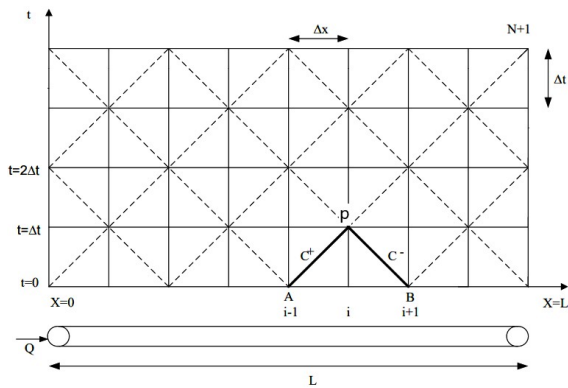


Рисунок 3.1 – Расчетная сетка метода характеристик [3]

Для вычисления этих параметров используем стандартную процедуру, которая есть во многих научных источниках, например, в [2]–[5]. Следуя этим работам, запишем механизм расчета необходимых параметров для определения напора и расхода жидкости в трубе. H и Q во внутренних узлах p сетки дискретизации определяются следующим образом:

$$H_{p_i} = \frac{C_p + C_M}{2}, Q_{p_i} = \frac{C_p - C_M}{2B},$$

где H – напор (м); t – время (с); C – скорость волны в трубе (м/с); $g = 9,82 \text{ м/с}^2$ – ускорение свободного падения; $A = \pi D^2 / 4$ – площадь поперечного сечения трубопровода (м^2); Q – расход жидкости ($\text{м}^3/\text{с}$); x – расстояние вдоль трубы (м); $R = f \Delta x / (2gDA^2)$ – коэффициент сопротивления; $B = C / (gA)$; f – коэффициент трения Дарси – Вайсбаха; Δx – шаг при разбиении трубы (м); D – внутренний диаметр трубы (м).

Значения C_p и C_M определяются из соотношений [3]

$$C_p = H_{i-1} + BQ_{i-1} - RQ_{i-1}|Q_{i-1}|,$$

$$C_M = H_{i+1} - BQ_{i+1} + RQ_{i+1}|Q_{i+1}|.$$

Граничные условия рассматриваемой задачи следующие:

– в резервуаре (левая граница):

$$H_{p_1} = H_0; Q_{p_1} = (H_{p_1} - C_M) / B;$$

– в области закрытия клапана (правая граница):

$$Q_{p_{NS}} = -BC_v + \sqrt{(BC_v)^2 + 2C_p C_v},$$

$$H_{p_{NS}} = C_p - BQ_{p_{NS}}, C_v = \frac{(Q_0 \tau)^2}{2H_0}, \tau = \left(1 - \frac{t}{t_c}\right)^s,$$

где H_0 и Q_0 – напор в резервуаре и расход жидкости соответственно; t_c – время закрытия задвижки (с); s – константа, характеризующая быстроту закрытия клапана (если $s = 0$, то предполагается, что клапан закрывается мгновенно, что приводит к максимальному пику давления; при $0 < s < 1$

скорость потока будет быстро уменьшаться в начале и медленно уменьшаться в конце закрытия; при $s = 1$ во время перекрытия будет наблюдаться линейное падение расхода; при $s > 1$, скорость потока будет медленно снижаться в начале и быстро уменьшаться в конце перекрытия). Для реализации метода характеристик при гидроударе в случае закрытия задвижки при течении жидкости в композитной волокнистой трубе с начальными напором и скоростью был составлен алгоритм математического моделирования расчета параметров и создана компьютерная программа.

4 Пример расчета давления и расхода жидкости

Для полного описания расчета напора и расхода жидкости при гидравлическом ударе рассмотрим трубу из полиэтилена (модули упругости и коэффициенты Пуассона матрицы равны $E_m = 1,43 \text{ ГПа}$, $\nu_m = 0,4$, а волокна соответственно равны $E_f = 207 \text{ ГПа}$, $\nu_f = 0,3$, $V = 1,48\%$ [4]) с радиусом $r_a = 0,232 \text{ м}$ и толщиной стенки $\delta = 0,018 \text{ м}$, усиленную обмоткой стальных волокон. По предложенной методике была составлена программа на основе метода характеристик, в которой учитывался расчет скорости волны для композитной трубы и определялись основные параметры. Был произведен расчет напора и расхода жидкости и сделан анализ о влиянии расположения волокон (перпендикулярное, параллельное) в матрице композиционного материала трубы на скорость волны, давление и расход жидкости при гидроударе. Результаты вычислений показаны на рисунках 4.1–4.3. Труба из композита длиной $L = 2500 \text{ м}$ была разделена на 5 секций; задаются условия $H_0 = 49,95 \text{ м}$; $Q_0 = 0,1 \text{ м}^3/\text{с}$; коэффициент трения $f = 0,018$; $T_{max} = 50 \text{ с}$; время закрытия задвижки $t_c = 2,1 \text{ с}$ и $t_c = 0 \text{ с}$, константа s принята равной 1,5 и 0.

График зависимости скорости волны C от объемного содержания V и расположения волокон показан на рисунке 4.1 [7].

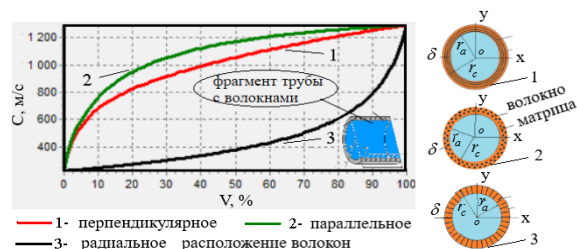


Рисунок 4.1 – График зависимости скорости волны C от объемного содержания V и расположения волокон в трубе из композита (толщина стенки $\delta = 0,018 \text{ м}$)

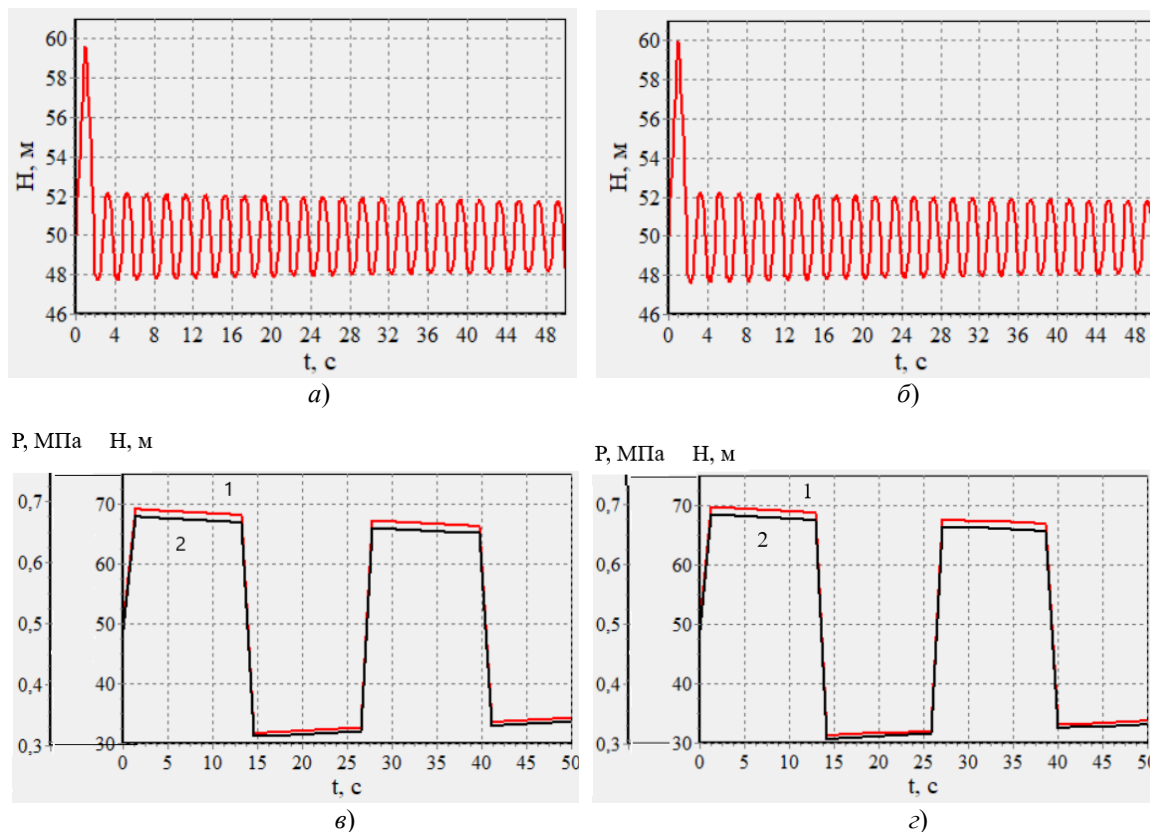


Рисунок 4.2 – Графики зависимости напора H (давления P) от t ($V = 1,48\%$):
 а) $t_c = 2,1$ с, $s = 1,5$ (перпендикулярное); б) $t_c = 2,1$ с, $s = 1,5$ (параллельное);
 в) $t_c = 0$ с, $s = 0$ (перпендикулярное), график 1 – H , график 2 – P ;
 з) $t_c = 0$ с, $s = 0$ (параллельное): график 1 – H , график 2 – P

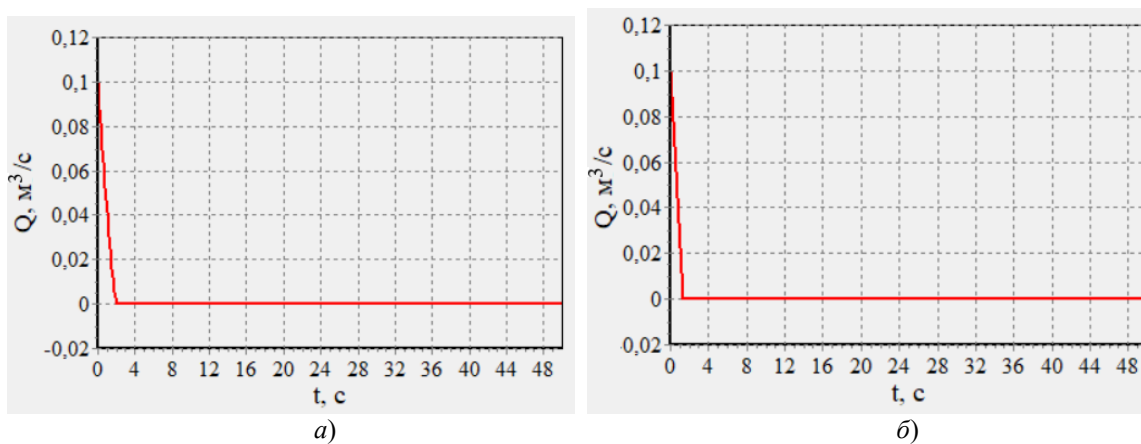


Рисунок 4.3 – Графики зависимости расхода жидкости Q от времени t ($V = 1,48\%$):
 а) $t_c = 2,1$ с, $s = 1,5$; б) $t_c = 0$ с, $s = 0$

На рисунке 4.2 и рисунке 4.3 представлены графики зависимости напора H и расхода жидкости Q при перпендикулярном и параллельном расположении волокон по отношению к оси z ($V = 1,48\%$) при $t_c = 2,1$ с, $s = 1,5$ и $t_c = 0$ с, $s = 0$. Скорость волны при перпендикулярном расположении волокон равна $C = 377$ м/с, при параллельном – $C = 388$ м/с (рисунок 4.1).

Из рисунков 4.2 в, з видно, что максимальные напоры незначительно отличаются от расположения волокон при полном закрытии задвижки: для перпендикулярного расположения волокон $H_{max} = 69,3$ м, параллельного – $H_{max} = 69,8$ м. Следовательно, можно использовать при расчетах формулу Жуковского Н.Е. для времени закрытия t_c меньше, чем фаза гидравлического удара T . Действительно, определив

$$\Delta H = H_{\max} - H_0 = \pm C \cdot 4Q_0 / (\pi D^2 g)$$

для перпендикулярного и параллельного расположения волокон, имеем: $H_{\max} = 69,5$ м и $H_{\max} = 71,1$ м соответственно.

Шаг по времени вычислялся по формуле $ht = L / (CN)$. Фаза $T = 2L / C$ для перпендикулярного расположения волокон составляет 13,3 с; для параллельного – 12,9 с, что отражено на рисунках 4.2 в, з.

По формуле Жуковского $\Delta P = \pm \rho \cdot C \cdot V_0$ для перпендикулярного расположения волокон $\Delta P = 0,19$ МПа, для параллельного – $\Delta P = 0,20$ МПа, что совпадает с результатами, представленными на рисунке 4.2 в, з.

Из рисунков 4.2 видно, что при небольшом содержании волокон ($V = 1,48\%$) с указанными физико-механическими характеристиками влияние их расположения на напор H незначительное, однако при большом содержании волокон отличие значений H может достигать 10% при перпендикулярном и параллельном расположении, что показано на рисунке 4.4. Следует отметить, что при параллельном расположении волокон H_{\max} больше, чем при перпендикулярном.

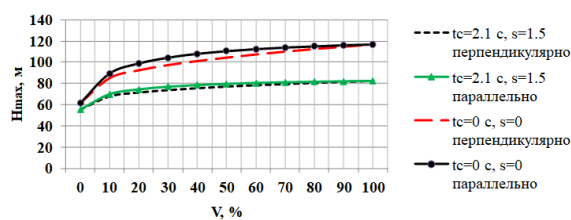


Рисунок 4.4 – Графики зависимости напора H_{\max} от объемного содержания волокон V

Колебание давления в трубе рассчитывается в 5-и точках трубы для разного временного состояния при течении жидкости до положения задвижки. Для краткости результаты приведены на рисунках 4.5 и 4.6.

Как видно из рисунков 4.5 и 4.6, для объемного содержания $V = 1,48\%$ металлических волокон в матрице из полиэтилена, влияние расположения волокон на параметры гидроудара незначительное в связи с близкими значениями скоростей волн в рассматриваемом случае.

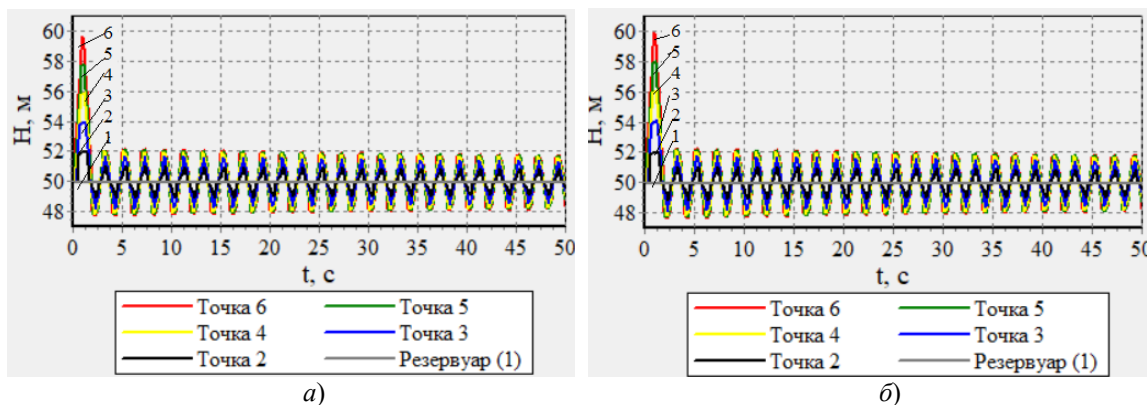


Рисунок 4.5 – Графики зависимости напора H от времени t в определенных точках трубы ($t_c = 2,1$ с; $s = 1,5$; $V = 1,48\%$): а) перпендикулярное, б) параллельное расположение волокон

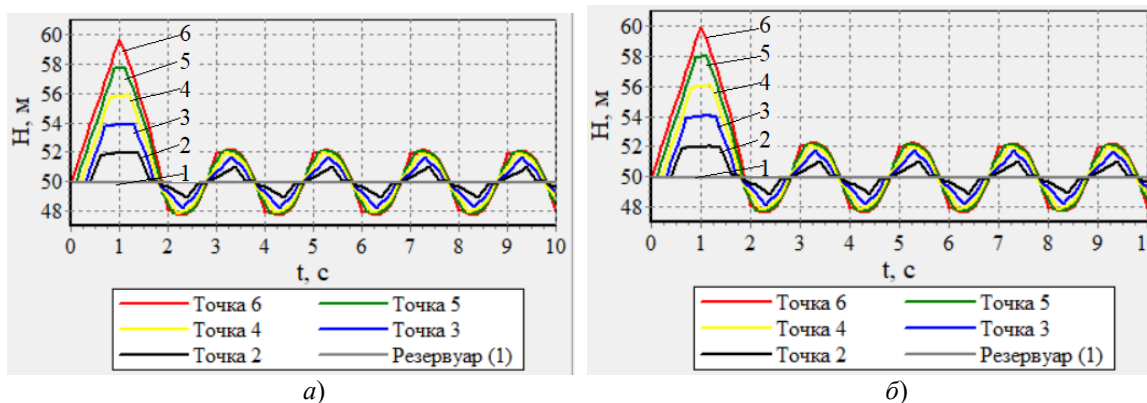


Рисунок 4.6 – Графики зависимости напора H от времени t в определенных точках трубы ($t_c = 2,1$ с; $s = 1,5$; $V = 1,48\%$): а) перпендикулярное, б) параллельное расположение волокон

Заключение

В статье предложена методика определения параметров гидравлического удара (скорости волны, напора, расхода жидкости) при движении жидкостей в однослойной трубе из композита с разным расположением волокон в матрице композиционного материала при условии, что оси анизотропии совпадают с направлением волокон. Теоретические результаты, а также расчеты по предложенной компьютерной программе, созданной на базе метода характеристик, которые представлены в данной работе, и, как показывают экспериментальные и другие теоретические исследования, адекватно отражают происходящие явления при гидроударе. Проведенные исследования показывают, что армирование может увеличить скорость ударной волны и вызвать дополнительные гидравлические скачки давления в трубопроводе, в основном, за счет увеличения объемного содержания V армирующих волокон в трубе из композита.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жуковский, Н.Е. О гидравлическом ударе в водопроводных трубах / Н.Е. Жуковский. – М.Д.: Гостехтеорелитиздат, 1949. – 104 с.
2. Mahdy, Mostafa. Analysis of water hammer using method of characteristics for different pipes material / Mostafa Mahdy // International Journal of Latest Technology in Engineering, Management & Applied Science (IJLTEMAS). – 2019. – Vol. VIII, iss. I. – 9 p.
3. Rahul, Kr. Garg. Analysis of Hydraulic Transients in a Reservoir-Valve-Pipeline Arrangement by Using Method of Characteristics (MOC) / Rahul Kr. Garg, Dr. Arun Kumar // Conference Paper JCATAACE – 2018. – April 2018. – 9 p.
4. Wan, Wuyi. Shock wave speed and transient response of PE pipe with steel-mesh reinforcement / Wuyi Wan, Xinwei Mao // Hindawi Publishing Corporation Shock and Vibration. – 2016. – № 5. – Article ID 8705031. – 10 p. – DOI: <http://dx.doi.org/10.1155/2016/8705031>.
5. Попов, Д.Н. Гидромеханика: учеб. пособие / Д.Н. Попов, С.С. Панаиотти, М.В. Рябинин; под ред. Д.Н. Попова. – 3-е изд., испр. – Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. – 317 с.
6. Можаровский, В.В. Прикладная механика слоистых тел из композитов / В.В. Можаровский, В.Е. Старжинский. – Минск: Наука и техника, 1988. – 280 с.
7. Можаровский, В.В. Влияние схем армирования трубы из композита на скорость волны при гидравлическом ударе / В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 3 (56). – С. 21–25.
8. Можаровский, В.В. Скорость волны при гидроударе и напряженно-деформированное состояние слоистых футерованных труб из ортотропных материалов / В.В. Можаровский, С.В. Киргинцева // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 2 (51). – С. 44–51.
9. Прусов, И.А. Термоупругие анизотропные пластинки / И.А. Прусов. – Минск: Изд-во БГУ, 1978. – 200 с.

Поступила в редакцию 11.09.2023.

Информация об авторах

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

ОПТИМИЗАЦИЯ ЛАЗЕРНОГО РАСКАЛЫВАНИЯ СИЛИКАТНЫХ СТЕКОЛ ЭЛЛИПТИЧЕСКИМИ ПУЧКАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАМЕТРОВ МЕХАНИКИ РАЗРУШЕНИЯ

Ю.В. Никитюк¹, И.Ю. Аушев²

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Университет гражданской защиты МЧС Беларуси, Минск

OPTIMIZATION OF LASER CLEAVING OF SILICATE GLASSES WITH ELLIPTICAL BEAMS USING FRACTURE MECHANICS PARAMETERS

Yu.V. Nikityuk¹, I.Yu. Aushev²

¹Francisk Skorina Gomel State University

²University of Civil Protection of the Ministry for Emergency Situations of the Republic of Belarus, Minsk

Аннотация. В рамках механики разрушения с использованием генетического алгоритма была проведена оптимизация параметров резки силикатных стекол эллиптическими лазерными пучками. С использованием языка программирования APDL были выполнены расчеты температур, термоупругих напряжений и коэффициентов интенсивности напряжений. Были построены соответствующие регрессионные модели для пяти факторов: скорости резки, мощности лазера, длины стартовой трещины и длины полуосей эллиптического лазерного пучка. Значения максимальных температур в зоне обработки, значения термоупругих напряжений и коэффициентов интенсивности напряжений K_I в вершине стартовой трещины использовались в качестве откликов. Была проведена оценка влияния варьируемых факторов на отклик. Выполнено сравнение значений откликов, полученных в результате оптимизации с использованием генетического алгоритма со значениями, полученными в результате конечно-элементного моделирования. В результате оптимизации лазерного раскалывания эллиптическими пучками были установлены значения технологических параметров, обеспечивающие повышение надежности и производительности процесса резки силикатных стекол эллиптическими лазерными пучками.

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

Для цитирования: Никитюк, Ю.В. Оптимизация лазерного раскалывания силикатных стекол эллиптическими пучками с использованием параметров механики разрушения / Ю.В. Никитюк, И.Ю. Аушев // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 36–41. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_36. – EDN: EBJMJF

Abstract. This paper presents the optimization of cutting parameters of silicate glasses with elliptical laser beams as part of fracture mechanics using a genetic algorithm. Temperatures, thermoelastic stresses and stress intensity factors were calculated via APDL (Ansys Parametric Design Language). Corresponding regression models were built for five factors: cutting speed, laser power, initial crack length, and elliptical laser beam semi-axis length. The values of maximum temperatures in the treatment zone, values of thermoelastic stresses and stress intensity coefficients K_I at the initial crack tip were used as responses. The influence of varying factors on the responses was evaluated. The comparison of the response values, obtained as a result of optimization using a genetic algorithm with the values resulting from finite element simulation, was performed. As a result of optimizing laser cleaving with elliptical beams, the values of technological parameters were established. These parameters ensure an increase in reliability and productivity of the process of cutting silicate glasses with elliptical laser beams.

Keywords: laser cutting, crack, MOGA, ANSYS.

For citation: Nikityuk, Yu.V. Optimization of laser cleaving of silicate glasses with elliptical beams using fracture mechanics parameters / Yu.V. Nikityuk, I.Yu. Aushev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 36–41. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_36. – EDN: EBJMJF

Introduction

In the recent years, laser cutting of silicate glasses using laser-induced crack formation technologies has become widespread [1]–[9].

Simulation of laser cleaving processes, disregarding the initial crack, does not provide the possibility of sufficiently accurate determination of processing parameters, while simulation within thermoelasticity theory and linear fracture mechanics, taking into account the parameters of the initial defect

and using the finite element mesh rebuilding technique, ensures the necessary accuracy of calculations [10]–[14].

Increasing the efficiency of laser cutting of materials, including laser cleaving methods, can be achieved by optimizing processing parameters using genetic algorithms [15]–[18].

This study uses MOGA (multi-objective genetic algorithm) of the ANSYS software to optimize the parameters of cutting silicate glasses with

elliptical laser beams through laser cleaving using fracture mechanics parameters.

1 Determining the optimal parameters for laser cleaving of silicate glasses with elliptical laser beams

The calculations of temperature and thermoelastic stress fields as well as determination of the values of stress intensity coefficients K_I at the initial crack tip in silicate glasses during processing with elliptical laser beams were performed within the framework of the unrelated problem of thermoelasticity and fracture mechanics using APDL [19].

Figure 1.1 illustrates the scheme of the laser beam and refrigerant impact zones in the cutting plane. Position 1 marks the laser beam, position 2 indicates the refrigerant, and position 3 denotes the crack.

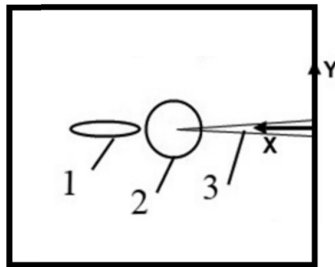


Figure 1.1 – Schematic of impact zones of laser beam and refrigerant in the cutting plane

The silicate glass properties given in [1] were used in the simulation process. The calculations were performed for a rectangular test piece with dimensions of $20 \times 10 \times 1$ mm. The model consisted of 5968 elements (see Figure 1.2, 1.3).

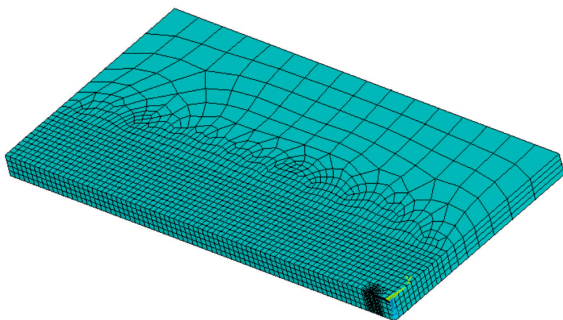


Figure 1.2 – Finite element model

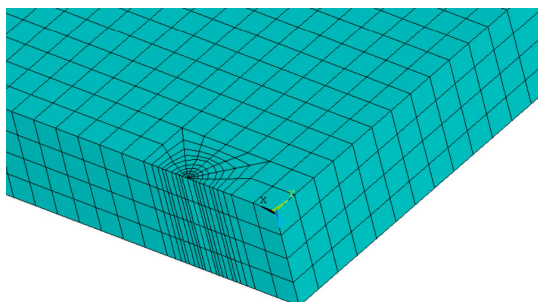


Figure 1.3 – Finite element mesh near the crack tip

The elements simulating the stress singularity at the crack tip were used to improve the accuracy of K_I calculations. Here, to obtain the root asymptotics at the crack tip, the element nodes were shifted by a quarter of the element side in the direction of the tip [19].

The calculations were performed for the laser beam with a wavelength equal to $10.6 \mu\text{m}$. The processing speed was $V = 15 \cdot 10^{-3}$ m/s. The following values of laser beam parameters were used: major semi-axis $3 \cdot 10^{-3}$ m, minor semi-axis $B = 1 \cdot 10^{-3}$ m. The length of the initial crack was $L = 1 \cdot 10^{-3}$ m.

Figures 1.4–1.9 show the calculated values of temperature and thermoelastic stress fields.

The calculated temperatures at the initial crack tip do not exceed the glass transition temperature (for silicate glass sheet it is 789 K), which ensures the absence of thermoelastic stress relaxation.

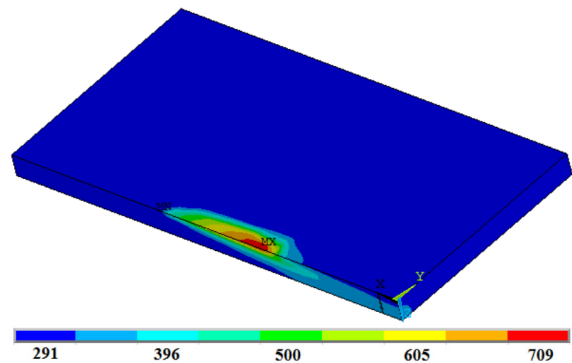


Figure 1.4 – Temperature distribution in the volume of the sample to be treated, °K

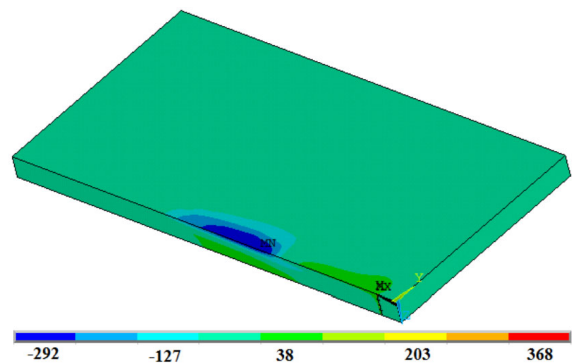


Figure 1.5 – Distribution of stresses σ_y in the volume of the sample to be treated, MPa

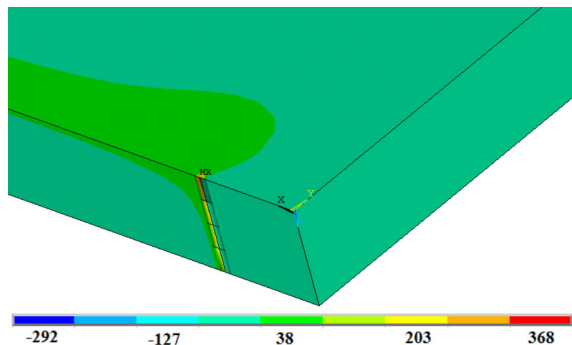


Figure 1.6 – Distribution of stresses σ_y near the crack tip, MPa

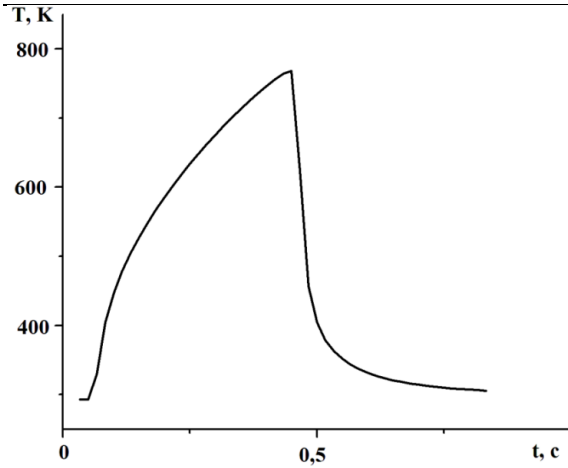


Figure 1.7 – Calculated values of temperature T at the crack tip

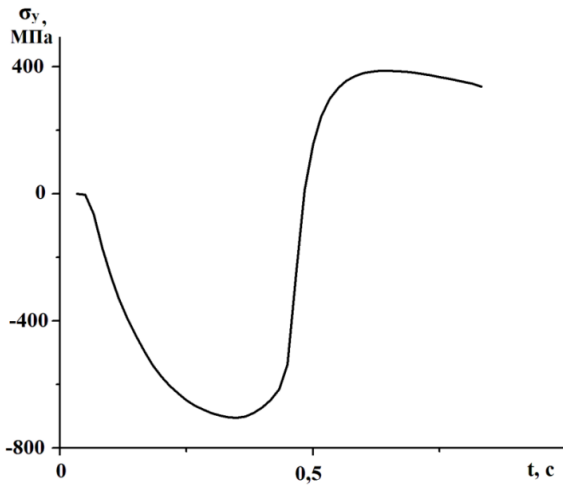


Figure 1.8 – Calculated values of elastic stresses σ_y at the crack tip

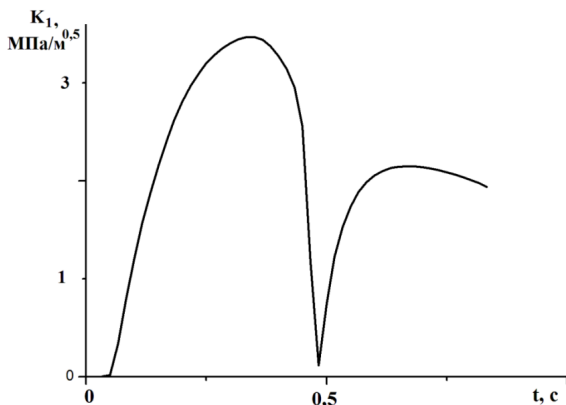


Figure 1.9 – Calculated values of stress intensity factor K_I at the crack tip

As Figure 1.8 shows, significant compressive stresses are formed at the initial crack tip as a result of laser heating with an elliptical beam. After refrigerant exposure, tensile stresses are formed there as well. At the crack tip, the values of stress intensity coefficients have reached their maximum values twice. The second maximum of the values of the

stress intensity coefficients corresponds to the tensile stresses at the crack tip (see Figure 1.9). Thus, the necessary conditions for the initiation of crack development are fulfilled: $\sigma_y > 0$ and $K_I > K_{Ic}$ (for silicate glass the critical stress intensity factor is $K_{Ic} = 0.5 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$).

This study used MOGA of the DesignXplorer module to optimize the cutting parameters of silicate glasses with elliptical laser beams.

The response surfaces were generated using a five-factor version of the central composite design of the numerical experiment [20]. The following factors were used as variable factors: $P1$ is the processing speed V , $P2$ is the beam power P , $P3$ is the large semi-axis of the laser beam A , $P4$ is the small semi-axis of the beam B , $P5$ is the length of the initial defect L .

The maximum temperatures T and thermoelastic stresses σ_y in the treatment zone, values of stress intensity coefficients K_I were determined as responses (see Table 1.1).

The response functions relating the output parameters (T , σ_y , K_I) to the factors (V , P , A , B , L) are as follows:

$$Y_T = 8.99 - 19.1V + 0.262P - 476A - 1440B - 0.00308V^2 + 34800P^2 + 3.51 \cdot 10^5 A^2 - 1.33VP + 2870VA - 11.3PA - 44.5PB + 1.27 \cdot 10^5 AB,$$

$$T = (0.065Y_T + 1)^{\frac{1}{0.065}} - 1,$$

$$Y_\sigma = 43.94 - 689V - 1.79P + 1870A + 7510B + 11600V^2 + 0.0553P^2 - 2.08 \cdot 10^5 A^2 - 3.11 \cdot 10^6 B^2 - 6.29VP - 1.04 \cdot 10^4 VB - 3.12 \cdot 10^4 VL - 52.6PL + 1.55 \cdot 10^5 BL,$$

$$\sigma_y = (0.09Y_\sigma + 1)^{\frac{1}{0.09}} - 1,$$

$$Y_K = 119.7 - 8710V + 21.8P + 2.75 \cdot 10^4 A + 1.01 \cdot 10^5 B + 1.95 \cdot 10^5 V^2 - 0.583P^2 - 2.66 \cdot 10^6 A^2 - 3.94 \cdot 10^7 B^2 - 229VP - 2.26 \cdot 10^5 VA - 3.52 \cdot 10^5 VB + 304PA - 696PL - 1.98 \cdot 10^6 AL + 1.81 \cdot 10^6 BL,$$

$$K_I = (0.3Y_K + 1)^{\frac{1}{0.3}} - 1.$$

The following criteria were used to evaluate the resulting regression equations:

– determination coefficient

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

– Root Mean Square Error (RMSE)

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

Table 1.1 – Experimental design and calculation results

N	P1 $V, \text{m/s}$	P2 P, W	P3 A, m	P4 B, m	P5 L, m	P6 $T, \text{°K}$	P7 σ_y, MPa	P8 $K_I, \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$
1	0.015	7.5	0.003	0.001	0.0015	650	271	1.50
2	0.01	7.5	0.003	0.001	0.0015	708	420	2.36
3	0.02	7.5	0.003	0.001	0.0015	611	193	1.06
4	0.015	5	0.003	0.001	0.0015	531	180	1.00
5	0.015	10	0.003	0.001	0.0015	769	361	2.00
6	0.015	7.5	0.002	0.001	0.0015	738	235	1.30
7	0.015	7.5	0.004	0.001	0.0015	595	294	1.64
8	0.015	7.5	0.003	0.0005	0.0015	861	213	1.15
9	0.015	7.5	0.003	0.0015	0.0015	545	266	1.50
10	0.015	7.5	0.003	0.001	0.001	649	290	1.61
11	0.015	7.5	0.003	0.001	0.002	650	257	1.42
12	0.01	5	0.002	0.0005	0.002	852	174	9.50
13	0.02	5	0.002	0.0005	0.001	749	914	4.84
14	0.01	10	0.002	0.0005	0.001	1410	404	2.20
15	0.02	10	0.002	0.0005	0.002	1205	156	0.82
16	0.01	5	0.004	0.0005	0.001	630	245	1.36
17	0.02	5	0.004	0.0005	0.002	578	961	0.48
18	0.01	10	0.004	0.0005	0.002	968	434	2.39
19	0.02	10	0.004	0.0005	0.001	863	232	1.24
20	0.01	5	0.002	0.0015	0.001	537	248	1.41
21	0.02	5	0.002	0.0015	0.002	472	102	0.57
22	0.01	10	0.002	0.0015	0.002	782	451	2.56
23	0.02	10	0.002	0.0015	0.001	650	227	1.27
24	0.01	5	0.004	0.0015	0.002	466	286	1.63
25	0.02	5	0.004	0.0015	0.001	420	145	8.12
26	0.01	10	0.004	0.0015	0.001	637	618	3.53
27	0.02	10	0.004	0.0015	0.002	547	250	1.36

where d_i is the values determined by the finite element method; y_i is the values determined using regression models.

The determination coefficients for the output parameters T , σ_y and K_I are 0.9993, 0.9997 and 0.9996, respectively. The RMSE values for T , σ_y and K_I are 5.8°K , 2.2 MPa and $0.013 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, respectively. This allows concluding about the necessary correspondence of regression models to finite element analysis data.

The data presented in Figure 1.10 also confirm the adequacy of the resulting regression equations. The graph shows the normalized values obtained by finite element simulation on the abscissa and the corresponding normalized values obtained by regression equations on the ordinate. The accuracy of the regression model is higher when the points are closer to the diagonal of the graph.

The study on the influence of input parameters on output parameters has revealed that the laser beam power and its geometrical parameters have the most significant effect on the maximum values of temperature T in the treatment zone, while the processing speed and the laser power have the greatest effect on the maximum thermoelastic stresses σ_y and

the values of stress intensity coefficients K_I . Here, the length of the initial crack also affects considerably these responses (see Figure 1.11).

Figures 1.12–1.14 illustrate the diagrams showing how the maximum temperature in the treatment zone T , tensile stresses σ_y and stress intensity factors at the crack tip depend on the factors.

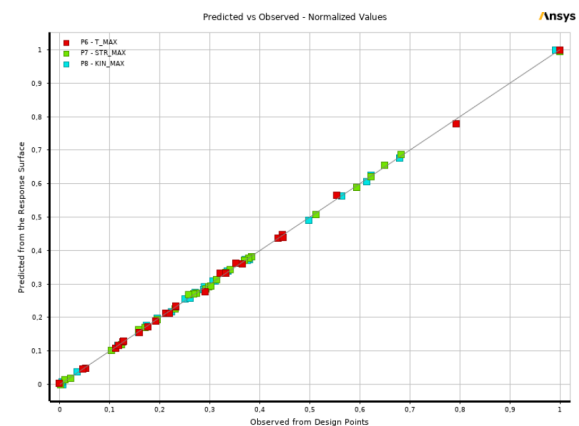


Figure 1.10 – Adequacy test of regression equations P6 – T , P7 – σ_y , P8 – K_I

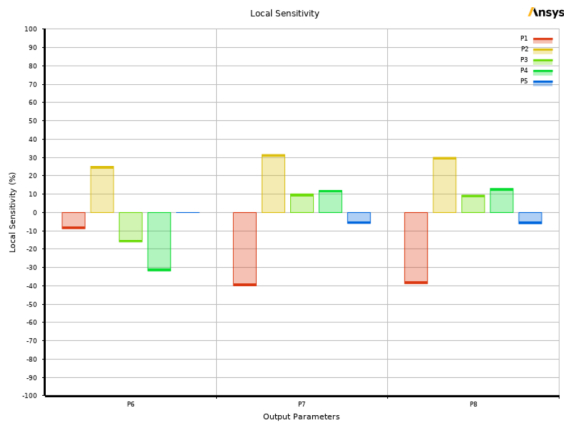


Figure 1.11 – Response sensitivity diagram P1 – V, P2 – P, P3 – A, P4 – B, P5 – L

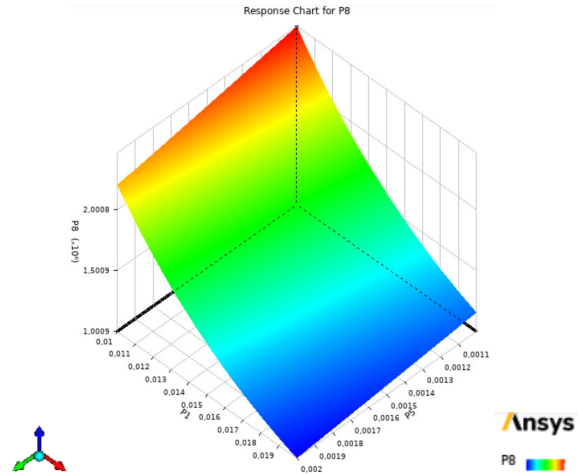


Figure 1.14 – Dependence of stress intensity factors at the crack tip K_I , $\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ on processing parameters P1 – V, P5 – L

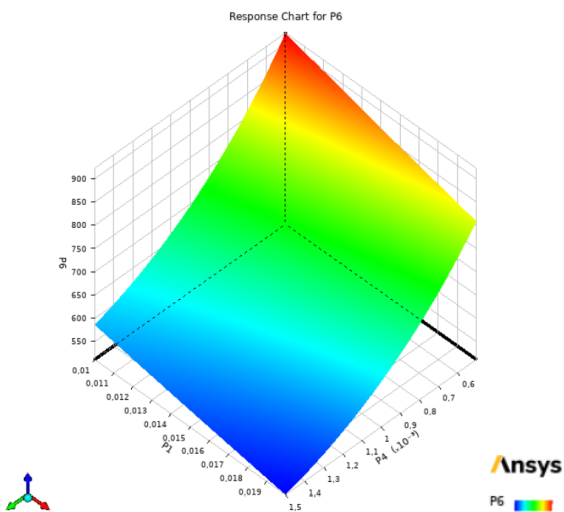


Figure 1.12 – Dependence of maximum temperature T , K on processing parameters P2 – P, P4 – B

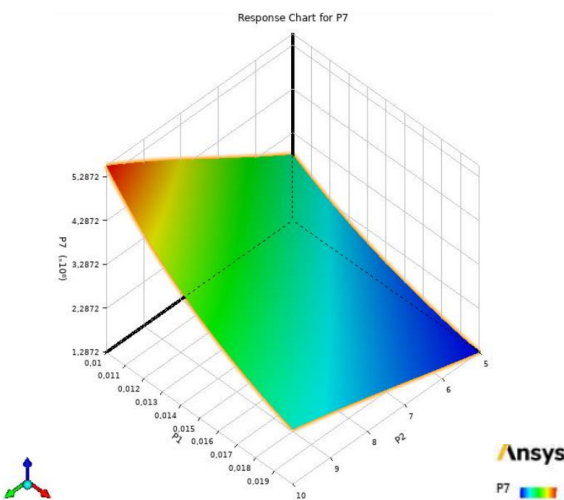


Figure 1.13 – Dependence of stresses at the crack tip σ_y , MPa on processing parameters P1 – V, P2 – P

2 The optimization of laser cleaving of silicate glass with elliptical laser beams

The optimization of laser cleaving of silicate glass with elliptical laser beams was performed using MOGA of the DesignXplorer module with an initial population of 500 individuals and the number of individuals per iteration also equaling 500.

The optimization was done following the criterion of processing speed maximum $V \rightarrow \max$ at the maximum temperature in the treatment zone $T \leq 789\text{K}$ and the minimum values of stress intensity factors at the crack tip exceeding the values of the critical stress intensity factor $K_I > K_{Ic}$.

The optimization results are given in Table 2.1, where the parameter values obtained by finite element simulation are given in brackets. Here, the maximum relative error of the results obtained using MOGA did not exceed 8% when determining the responses.

Table 2.1 – Optimization results

N	1
P1 V , m/s	0.02
P2 P , W	8.9
P3 A , m	0.002
P4 B , m	0.0015
P5 L , m	0.0012
P6 T , °K	601 (554)
P7 σ_y , MPa	214 (231)
P8 K_I , $\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$	1.17 (1.26)

Conclusion

This paper demonstrated the possibility of optimizing silicate glass processing parameters as part of thermoelasticity and fracture mechanics theory using a genetic algorithm. The regression models of glass thermal cleaving using the central composite experimental design were obtained. The correspondence

between regression models and finite element analysis results was established. The numerical experiments resulted in the determination of the optimal parameters for thermal cleaving of silicate glass by elliptical laser beams based on fracture mechanics criteria.

REFERENCES

1. *Machulka, G.A.* Laser processing of glass / G.A. Machulka. – Moscow: Sov. radio, 1979. – 136 p.
2. *Nisar, S.* Laser glass cutting techniques – A review / S. Nisar // Journal of laser applications. – 2013. – Vol. 25, № 4. – P. 042010-1–11.
3. *Two-beam laser thermal cleavage of brittle nonmetallic materials* / S.V. Shalupaev, E.B. Shershnev, Y.V. Nikityuk, A.A. Sereda // Journal of Optical Technology. – 2006. – Vol. 73, № 5. – P. 356–359. – DOI: 10.1364/JOT.73.000356.
4. *Serdyukov, A.N.* Features of controlled laser thermal cleavage of crystalline silicon / A.N. Serdyukov, S.V. Shalupaev, Y.V. Nikityuk // Crystallography Reports. – 2010. – Vol. 55, № 6. – P. 933–937. – DOI: 10.1134/S1063774510060064.
5. *Features of controlled laser thermal cleavage of crystal quartz* / A.N. Serdyukov, E.B. Shershnev, Y.V. Nikityuk [et al.] // Crystallography Reports. – 2012. – Vol. 57, № 6. – P. 792–797. – DOI: 10.1134/S1063774512060120.
6. *Dual laser beam revising the separation path technology of laser induced thermal-crack propagation for asymmetric linear cutting glass* / C. Zhao, H. Zhang, L. Yang [et al.] // International Journal of Machine Tools and Manufacture. – 2016. – Vol. 106. – P. 43–55. – DOI: 10.1016/j.ijmachtools.2016.04.005.
7. *Effect of focus position and shear stresses on the crack sectional shape in semiconductor laser linear cutting glass* / C. Zhao, H. Zhang, Y. Wang [et al.] // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture. – 2017. – Vol. 231, № 12. – P. 2094–2102. – DOI: 10.1177/0954405415624464.
8. *Research Progress of Thermal Controlled Cracking of Hard-Brittle Plate* / H.L. Wang, Y. Wang, H.Z. Zhang, X.W. Wang // Wuji Cailiao Xuebao. – 2018. – Vol. 33, № 9. – P. 923–930. – DOI: 10.15541/jim20170546.
9. *Laser beam induced thermal-crack propagation for asymmetric linear cutting of silicon wafer* / X. Cheng, L. Yang, M. Wang [et al.] // Optics & Laser Technology. – 2019. – Vol. 120. – P. 105765. – DOI: 10.1016/j.optlastec.2019.105765.
10. *Shahani, A.R.* Simulation of glass cutting with an impinging hot air jet / A.R. Shahani, M. Seyedian // International journal of solids and structures. – 2004. – Vol. 41, № 5–6. – P. 1313–1329.

11. *Analysis of laser thermosplitting processes within the framework of the linear fracture mechanics* / S.V. Shalupaev, M. Aleksiejuk, Y.V. Nikityuk, A.A. Sereda // Ceramics. Polish Ceramic Bulletin. – 2008. – Vol. 101. – P. 275–284.

12. *Analysis of the crack development process during controlled laser thermal cleaving of silicate glasses as part of linear fracture mechanics* / S.V. Shalupaev, Yu.V. Nikityuk, A.A. Sereda // Proceedings of F. Skorina Gomel State University. – 2012. – № 6 (75). – P. 99–104.

13. *Simulation of double-beam laser thermal cleaving of silicate glasses as part of linear fracture mechanics* / S.V. Shalupaev, A.N. Serdyukov, Yu.V. Nikityuk, A.A. Sereda // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2013. – № 2 (15). – P. 29–34.

14. *Special features of laser thermal cleaving of quartz glass* / E.B. Shershnev, Yu.V. Nikityuk, S.I. Sokolov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2013. – № 3 (16). – P. 39–44.

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. – № 85. – P. 135–145.

16. *Optimization of parameters of laser cleaving of quartz glass* / Yu.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Y. Aushev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2021. – № 4 (49). – P. 21–28. – DOI: 10.54341/20778708_2021_4_49_21.

17. *Nikityuk, Y.V.* Optimization of two-beam laser cleavage of silicate glass / Y.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Y. Aushev // Journal of Optical Technology. – 2022. – Vol. 89, № 2. – P. 121–125. – DOI: 10.1364/JOT.89.000121.

18. *Optimization of parameters of double-beam asymmetric laser cleaving of silicate glass* / Yu.V. Nikityuk, A.A. Sereda, A.N. Serdyukov [et al.] // Journal of Optical Technology. – 2023. – Vol. 90, № 6. – P. 15–24. – DOI: 10.17586/1023-5086-2023-90-06-15-24.

19. *Morozov, E.M.* ANSYS in the hands of an engineer: Fracture mechanics / E.M. Morozov, A.Yu. Muizemnek, A.S. Shadsky. – Moscow: LE-NAND, 2008. – 456 p.

20. *Morgunov, A.P.* Planning and analysis of experimental results: tutorial / A.P. Morgunov, I.V. Revina; Ministry of Education and Science of Russia, Omsk State tech. un-t. – Omsk : Publishing house OmSTU, 2014. – 343 p

The article was submitted 31.07.2023.

Информация об авторах

Никитюк Юрий Валерьевич – к.ф.-м.н., доцент
Аушев Игорь Юрьевич – к.т.н., доцент

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЦИРКОНИЕМ И КРЕМНИЕМ

А.С. Руденков, Д.Г. Пилипцов, А.Н. Купо, С.А. Фролов

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF CARBON COATINGS DOPED WITH ZIRCONIUM AND SILICON

A.S. Rudenkov, D.G. Piliptsov, A.N. Kupo, S.A. Frolov

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Определено влияние параметров углеродной плазмы на химический и фазовый состав, морфологию, механические свойства углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием из газового потока, генерируемого стационарным электродуговым испарением. Установлено, что увеличение частоты следования импульсов углеродной плазмы и связанное с ним уменьшение концентрации циркония приводит к возрастанию нанотвердости композиционных покрытий, обусловленному повышением содержания sp^3 -гибридизированных атомов углерода.

Ключевые слова: углеродные покрытия, кремний, цирконий, химический состав, морфология, фазовый состав, твердость, пластичность.

Для цитирования: Структура и механические свойства углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием / А.С. Руденков, Д.Г. Пилипцов, А.Н. Купо, С.А. Фролов // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 42–47. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_42. – EDN: FWWCTQ

Abstract. The influence of carbon plasma parameters on the chemical and phase composition, morphology, and mechanical properties of carbon coatings doped with zirconium and silicon from a gas flow generated by stationary electric arc evaporation has been determined. It has been established that an increase in the repetition rate of carbon plasma pulses and the associated decrease in zirconium concentration leads to an increase in the nanohardness of composite coatings, due to an increase in the content of sp^3 -hybridized carbon atoms.

Keywords: carbon coatings, silicon, zirconium, chemical composition, morphology, phase composition, hardness, plasticity.

For citation: Structure and mechanical properties of carbon coatings doped with zirconium and silicon / A.S. Rudenkov, D.G. Piliptsov, A.N. Kupo, S.A. Frolov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 42–47. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_42 (in Russian). – EDN: FWWCTQ

Введение

Углеродные покрытия обладают уникальным сочетанием свойств, в числе которых химическая инертность, низкий коэффициент трения, высокая микро- и нанотвердость, биосовместимость, прозрачность в инфракрасном диапазоне, электрическая проводимость, что способствует их широкому внедрению в различных областях, включая электронику, автомобильную промышленность, аэрокосмическую промышленность и даже медицину [1]–[5]. Однако, углеродные покрытия имеют и недостатки, в частности, низкую термостойкость (менее 350°C) и высокий уровень внутренних механических напряжений.

Изменение фазового состава углеродных покрытий, их легирование различными элементами являются эффективными технологическими приемами управления их структурой, а соответственно и свойствами [1]. Путем обоснованного выбора природы легирующего элемента, его оптимальной концентрации и объемного распределения можно существенным образом улучшить

эксплуатационные параметры покрытий и достичь необходимой многофункциональности [1]. В частности, легирование углеродных покрытий карбидообразующими металлами приводит к формированию в его объеме химических соединений, свойства которых, а также их дисперсность, морфология и характер распределения по толщине слоя в значительной степени определяют свойства покрытий в целом [1], [6]. Отметим также, что легирующие элементы оказывают каталитическое или ингибирующее влияние на процессы формирования sp^3 и sp^2 углеродных фаз.

Структура и свойства углеродных покрытий в значительной степени зависят от выбора метода, технологических режимов и условий их формирования, которые также оказывают существенное влияние на соотношение sp^3/sp^2 гибридных атомов углерода [1]. В числе параметров, наиболее эффективно влияющих на свойства углеродных покрытий, наряду с температурой подложки и мишени, давлением и составом атмосферы вакуумной камеры, отмечают

частоту углеродной плазмы, изменение которой достигается достаточно простыми методами [1].

Такое комплексное и в целом ряде систем неоднозначное влияние природы и концентрации легирующих элементов определяют важность проведения отдельных исследований, установление их оптимального химического состава при различных режимах генерации импульсной катодной углеродной плазмы.

Целью настоящей работы является определение химического и фазового состава, морфологии и механических свойств углеродных покрытий, бинарно легированных цирконием и кремнием, установление их зависимости от концентрации металлических ингредиентов, частоты следования углеродной плазмы. Выбор циркония и кремния в качестве легирующих элементов обусловлен различной химической активностью по отношению к углероду и кислороду и высокой эффективностью их применения для повышения термостойкости однокомпонентно легированных покрытий [5], [7].

1 Методика эксперимента

Композиционные углеродные покрытия, легированные цирконием и кремнием, были осаждены из газового потока сложного состава, образованного электродуговым испарением (ток дуги 80 А) циркония и импульсным искровым испарением составного графитового катода с кремниевыми вставками (напряжение разряда 350 В). Частота следования импульсов источника углеродной плазмы равнялась 5, 10, 15 Гц. Толщина покрытий составляла 280–300 нм.

Химический состав и структура химических связей определялись методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) при помощи рентгено-электронного спектрометра РНИ Quanterra (Япония) при возбуждении вещества К α -излучением алюминия с энергией кванта 1486,6 эВ и суммарной мощностью 250 Вт.

Морфология композиционных углеродных покрытий изучалась средствами специализированного аналитического программного комплекса Gwyddion, при помощи которого обрабатывались изображения, полученные при использовании атомно-силового микроскопа Solver Pro (NT-MDT, Россия). Изображения были получены в полуконтактном режиме, площадь сканирования – 4×4 мкм. В качестве основных параметров рассматривались: субшероховатость R_{ms} , количество отдельных структурных образований (далее зерен) на рассматриваемом участке, средняя высота и средний диаметр зерен.

Анализ фазового состава композиционных углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием, определялся средствами спектроскопии комбинационного рассеяния при помощи спектрометра Senterra (Bruker, Германия), длина волны возбуждающего излучения – 532 нм, мощность – 5 мВт.

Значения нанотвердости H и модуля упругости E были получены при помощи нанотвердомера НаноСкан 4D (ТИСНУМ, Россия), оснащённого алмазным индентором Берковича.

2 Результаты и их обсуждение

Показано, что с увеличением частоты следования импульсов от 5 Гц до 15 Гц источника углеродной плазмы, концентрация углерода увеличивается, а концентрация циркония в композиционном покрытии уменьшается (таблица 2.1). Данный факт обусловлен изменением плотности потока углеродной плазмы, генерируемой импульсным катодно-дуговым источником по отношению к потоку металлической плазмы, образованной электродуговым источником в стационарном режиме.

Таблица 2.1 – Элементный состав углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием

Покрытие	Частота следования импульсов, Гц	Концентрация элементов в покрытии, ат. %			
		C	Zr	O	Si
C+Zr+Si	5	47,4	27,0	24,2	1,4
	10	82,1	7,6	8,5	1,8
	15	89,3	4,8	3,9	2,0

Кроме того, установлено, что с увеличением частоты следования импульсов концентрация кислорода в покрытии уменьшается. По всей видимости, это объясняется снижением интенсивности адсорбции атомов кислорода легирующими элементами вследствие снижения их концентрации в покрытии. При этом основным связывающим кислород элементом является цирконий, так как концентрация кремния в покрытии не изменяется существенным образом.

Средствами АСМ установлено, что субшероховатость и средний диаметр отдельных структурных образований углеродных покрытий, легированных цирконием, изменяются в достаточно широких пределах в зависимости от режима генерации углеродной плазмы (рисунок 2.1, таблица 2.2). Некоторые колебания отдельных параметров, характеризующих рельеф поверхности, могут объясняться присутствием капельной фазы в потоке металлической плазмы, генерируемой электродуговым источником.

Методом РФЭС определены особенности химического состава полученных покрытий. Анализ пиков РФЭ спектров проводился методом их разложения при помощи функции Лоренца – Гаусса на характерные полосы. С1s пик РФЭС композиционных углеродных покрытий разлагался на следующие компоненты (рисунок 2.2): C – Zr с энергией связи $\sim 283,3$ eV с энергией связи $\sim 284,4$ eV, Csp³ с энергией связи $\sim 285,2$ eV

и $C - O \sim 286,0$ эВ [8]–[10]. Пик $Zr3d$ расположен в области энергий 181–185 эВ [11] и имеет два достаточно интенсивных максимума, соответствующих спин-орбитальным компонентам $3d$ -уровней – $3d^{5/2}$ и $3d^{3/2}$ [12], которые можно разложить на 4 пика (рисунок 2) около 180, 182, 183, 185 эВ. Первая пара пиков соотносится с $Zr - C$, а вторая – с $Zr - O$ [9], [11], [12].

Смещение составляющих $Zr3d$ пиков согласно [9], [12] может быть обусловлено как изменением концентрации циркония в покрытии, так и условиями осаждения, в первую очередь, температурой подложки, влияющей на формирование аллотропных модификаций химических соединений циркония с кислородом. Необходимо отметить, что при использовании импульсного электродугового источника температура подложки повышается с возрастанием частоты следования импульсов [5].

Анализ результатов обработки спектров РФЭС (таблица 2.3) показывает, что увеличение частоты следования импульсов приводит к возрастанию доли Csp^3 компоненты $C1s$ пика и уменьшению доли компоненты, соответствующей $Zr - C$. Это объясняется снижением концентрации циркония, а, значит, и снижением содержания карбида циркония в покрытии.

Кроме этого, анализ $Zr3d$ пика показывает, что если при частоте 5 Гц, относительная доля оксида циркония выше, чем доля карбида циркония ($Zr - C / Zr - O$ менее 1), то с увеличением частоты следования импульсов цирконий находится, главным образом, в виде карбида ($Zr - C / Zr - O$ более 1). Данный факт может быть обусловлен увеличением температуры подложки, вследствие повышения частоты следования импульса.

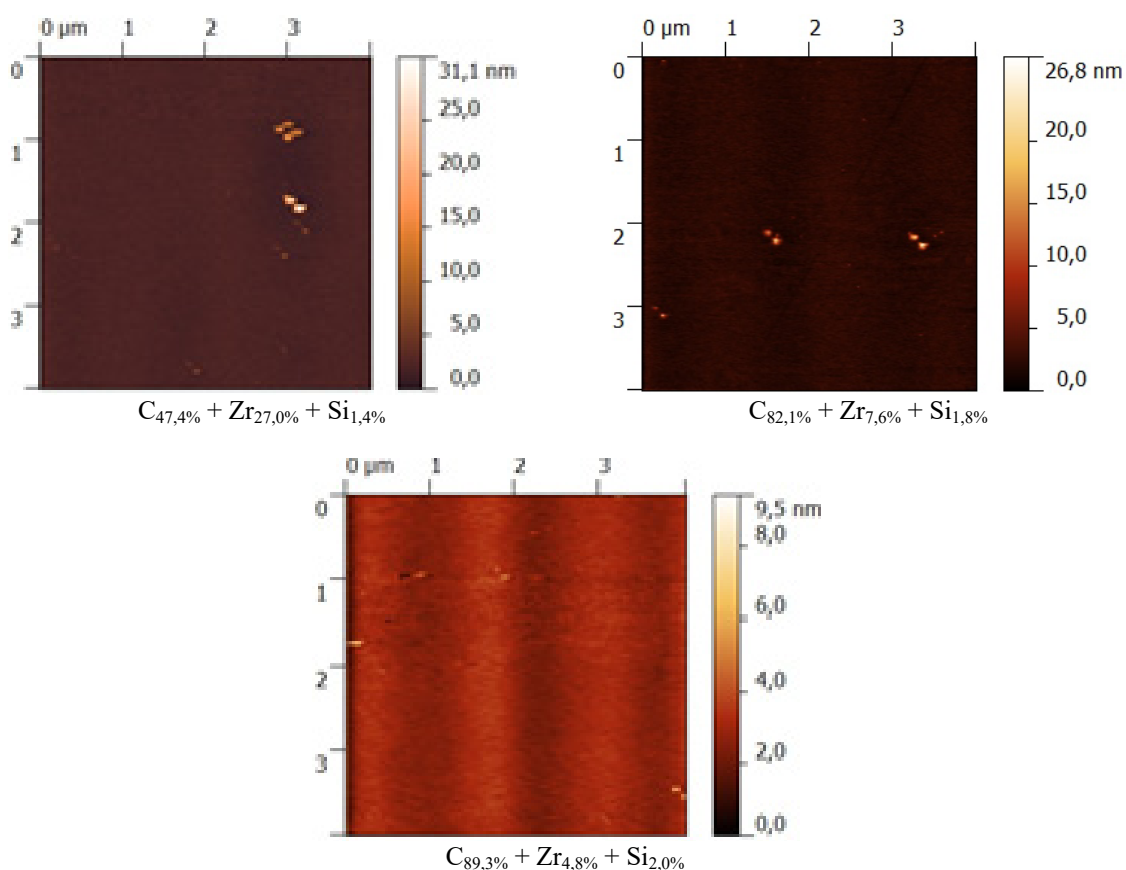


Рисунок 2.1 – АСМ изображения поверхности углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием

Таблица 2.2 – Морфологические параметры углеродных покрытий, легированных цирконием и хромом

Образец	Средняя высота, нм	R_{ms} , нм	Плотность зерен, шт.	Средний диаметр зерен, нм
$C_{47,4\%} + Zr_{27,0\%} + Si_{1,4\%}$	2,3	0,6	35	48
$C_{82,1\%} + Zr_{7,6\%} + Si_{1,8\%}$	2,0	0,4	54	35
$C_{89,3\%} + Zr_{4,8\%} + Si_{2,0\%}$	4,7	0,7	45	38

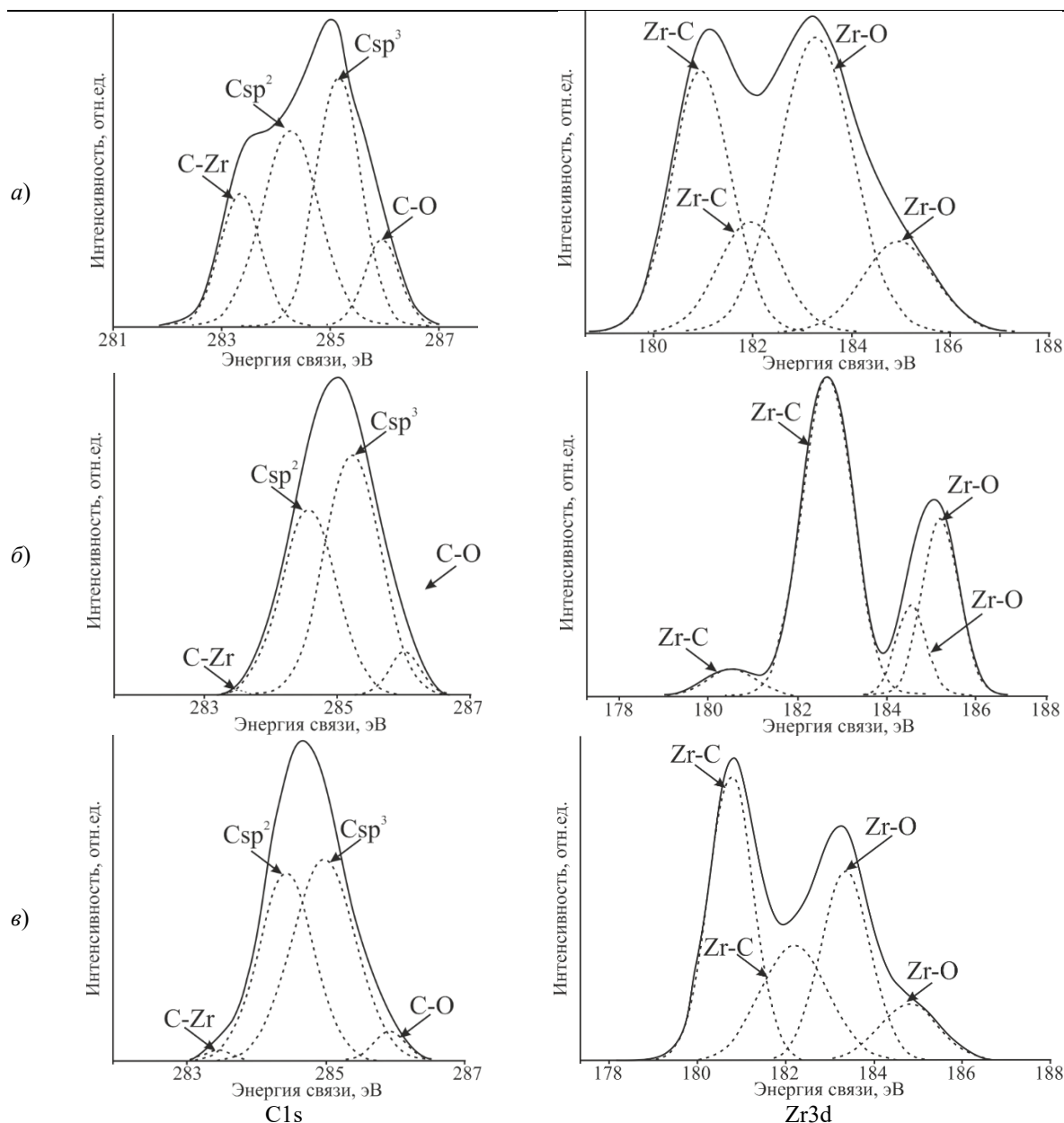


Рисунок 2.2 – РФЭ спектры углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием:
 а) $C_{47,4\%} + Zr_{27,0\%} + Si_{1,4\%}$, б) $C_{82,1\%} + Zr_{7,6\%} + Si_{1,8\%}$, в) $C_{89,3\%} + Zr_{4,8\%} + Si_{2,0\%}$

Анализ пика Si2p был затруднен высоким уровнем шумов, не позволяющих достоверно провести обработку.

Результаты спектроскопии комбинационного рассеяния (таблица 2.4) также свидетельствуют об уменьшении содержания sp^2 -гибридизированных атомов углерода.

Спектры комбинационного рассеивания углеродных покрытий имеют пик, локализованный в области $1000\text{--}1800\text{ см}^{-1}$. Методика анализа углеродного пика заключается в его разложении на две гауссианы: в диапазоне $1350\text{--}1400\text{ см}^{-1}$ расположен D-пик, который соответствует матрице на основе sp^2 -гибридизированных атомов и содержащий sp^3 -гибридизированные атомы [13]; в диапазоне около $1560\text{--}1580\text{ см}^{-1}$ расположен G-пик, соответствующий sp^2 -гибридизированным атомам углерода [14].

Показано, что с увеличением частоты следования импульсов наблюдается уменьшение соотношения I_D / I_G . С увеличением содержания sp^3 -фазы sp^2 -кластеры становятся меньше, углеродные кольца разрушаются на сегменты с цепочками $C = C$ групп, а интенсивность D-пика, обусловленная модами ароматических sp^2 -колец, снижается [13]. Кроме того, положение G-пика смещается к 1520 см^{-1} , что связано с увеличением степени топологической разупорядоченности графита.

Изменение соотношения I_D / I_G может быть обусловлено не только изменением фазового соотношения sp^3 / sp^2 [15], но и смещением D-пика вследствие изменения концентрации карбидов металла [16]. Легирование углеродных покрытий металлами в некоторых случаях может способствовать графитизации покрытия [17].

Таблица 2.3 – Фазовый состав углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием, на основании анализа параметров их РФЭ спектров

Покрытие	Пики РФЭ спектра	Тип связи	Пик, эВ ± 0,3 эВ	Ширина, эВ	Доля площади, %	Csp ³ / Csp ²	C – Zr / Csp ³ + Csp ²	Zr – C / Zr – O
C _{47,4%} + Zr _{27,0%} + Si _{1,4%}	C1s	C-Zr	283,3	0,9	17,6	0,99	0,24	0,79
		Csp ²	284,3	1,2	36,4			
		Csp ³	285,2	1,0	36,2			
		C-O	286,0	0,8	9,8			
	Zr3d	*Zr-C ^{5/2}	181,0	1,4	30,3			
		*Zr-C ^{3/2}	182,0	1,5	13,7			
		*Zr-O ^{5/2}	183,3	1,8	43,3			
		*Zr-O ^{3/2}	184,9	1,7	12,7			
C _{82,1%} + Zr _{7,6%} + Si _{1,8%}	C1s	C-Zr	283,5	0,3	0,3	1,30	< 0,01	1,85
		Csp ²	284,6	1,0	41,1			
		Csp ³	285,2	1,0	53,3			
		C-O	286,0	0,5	5,3			
	Zr3d	*Zr-C ^{5/2}	180,5	1,2	4,7			
		*Zr-C ^{3/2}	182,7	1,3	60,2			
		*Zr-O ^{5/2}	184,5	0,8	10,5			
		*Zr-O ^{3/2}	185,2	1,0	24,6			
C _{89,3%} + Zr _{4,8%} + Si _{2,0%}	C1s	C-Zr	283,4	0,4	1,4	1,66	< 0,01	1,61
		Csp ²	284,3	0,9	35,7			
		Csp ³	285,0	1,1	59,1			
		C-O	285,9	0,6	3,8			
	Zr3d	*Zr-C ^{5/2}	180,7	1,2	38,7			
		*Zr-C ^{3/2}	182,2	1,8	23,1			
		*Zr-O ^{5/2}	183,3	1,3	28,1			
		*Zr-O ^{3/2}	184,8	1,6	10,1			

* – спин-дублет Zr 3d^{5/2}, 3d^{3/2}

Таблица 2.4 – Параметры спектров КР углеродных покрытий, легированных цирконием и кремнием

Образец	D-пик		G-пик		I _D / I _G
	Положение, см ⁻¹	Ширина, см ⁻¹	Положение, см ⁻¹	Ширина, см ⁻¹	
C _{47,4%} +Zr _{27,0%} +Si _{1,4%}	1391,9	265,4	1534,6	146,3	0,91
C _{82,1%} +Zr _{7,6%} +Si _{1,8%}	1383,85	259,1	1534,5	203,6	0,67
C _{89,3%} +Zr _{4,8%} +Si _{2,0%}	1361,7	220,2	1524,0	210,8	0,52

Показано, что покрытия, сформированные при более высокой частоте следования импульсов источника углеродной плазмы (10 и 15 Гц) и имеющие низкое содержание циркония (7,6 ат. % и 4,8 ат. %), характеризуются более высокими значениями модуля упругости *E* и нанотвердости *H* по сравнению с покрытиями, сформированными с частотой следования импульсов 5 Гц с большим содержанием циркония (27 ат. %) (таблица 2.5).

Таблица 2.5 – Механические характеристики кремний-углеродных покрытий, легированных хромом

Образец	<i>H</i> , ГПа	<i>E</i> , МПа	<i>H</i> / <i>E</i>
C _{47,4%} + Zr _{27,0%} + Si _{1,4%}	12,5	142,8	0,088
C _{82,1%} + Zr _{7,6%} + Si _{1,8%}	14,4	157,3	0,091
C _{89,3%} + Zr _{4,8%} + Si _{2,0%}	14,2	157,0	0,090

Полученные данные находятся в соответствии с результатами, приведенными в работе [18], и свидетельствуют о более высокой пластичности покрытий с высоким содержанием циркония, что подтверждается увеличением соотношения *H/E* при снижении частоты следования импульсов и уменьшении концентрации циркония. Кроме этого, такое уменьшение пластичности может быть вызвано увеличением содержания кластеров из sp³-гибридизированных атомов углерода, что подтверждается результатами РФЭС, приведенными выше.

Выводы

Показано, что с увеличением частоты следования импульсов углеродной плазмы, содержащей кремний, при стационарном режиме электродугового испарения циркония в композиционных углеродных покрытиях, их морфология, элементный и фазовый состав изменяется в достаточно широких пределах.

Увеличение частоты следования импульсов источника углеродной плазмы и снижение концентрации циркония приводит к увеличению соотношения sp^3/sp^2 -гибридизированных атомов углерода и, как следствие, возрастанию нанотвердости покрытий. Показано, что при высокой концентрации циркония (27 % ат.) в композиционном покрытии, его большая доля находится в виде оксида, а при более низких значениях концентрации (7,6 ат. % и 4,8 ат. %) – в виде карбида.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Композиционные углеродные покрытия, осажденные из импульсной катодной плазмы* / Д.Г. Пилипцов, А.С. Руденков, П.А. Лучников, А.В. Рогачев, Цзян Сяо Хун, Чжоу Бин. – 2020. – Москва: Радиотехника. – 283 с.
2. *Donnet, C. Tribology of Diamond-like Carbon Films: Fundamentals and Applications* / C. Donnet, A. Erdemir. – Springer Science & Business Media, 2007. – 680 p.
3. *Ghadi, A. A comprehensive review on the carbide-base coatings produced by thermo-reactive diffusion: microstructure and properties viewpoints* / A. Ghadi, H. Ebrahimzad-Khaljiri, R. Gholizadeh // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2023. – Vol. 967. – Article 171839.
4. *Zia, A.W. Optimizing diamond-like carbon coatings – From experimental era to artificial intelligence* / A.W. Zia, S.A. Hussain, M.M.F. Ashraf Baig // *Ceramics International*. – 2022. – Vol. 48. – P. 36000–36011.
5. *Морфология и фазовый состав легированных кремнием углерод-титановых покрытий* / А.С. Руденков, А.В. Рогачев, Д.Г. Пилипцов // *Проблемы физики, математики и техники*. – 2021. – № 3 (48). – С. 37–41.
6. *Wei, Q. Structure and properties of novel functional diamondlike carbon coatings produced by laser ablation* / Q. Wei, J. Sankar, J. Narayan // *Surface and Coatings Technology*. – 2001. – Vol. 146 – № 147. – P. 250–257.
7. *Влияние режимов формирования и условий термообработки на фазовый состав и структуру кремний-углеродных покрытий, осаждаемых ионно-лучевым распылением* / А.С. Руденков, А.В. Рогачев, А.Н. Купо, С.М. Завадский, Д.А. Голосов, П.А. Лучников // *Нanomaterialы и наноструктуры – XXI век*. – 2019. – Т. 10, № 2. – С. 29–36.
8. *Long-term stability of hydrogenated DLC coatings: Effects of aging on the structural, chemical and mechanical properties* / M. Cloutier [et al.] // *Diamond and Related Materials*. – 2014. – Vol. 48. – P. 65–72.
9. *Evolution of Phase Composition and Antibacterial Activity of Zr – C Thin Films* / K. Mydlowska [et al.] // *Proceesses*. – 2020. – Vol. 8. – Article 260.
10. *Effect of nitrogen doping on the microstructure and thermal stability of diamond-like carbon coatings containing silicon and oxygen* / J. Peng

[et al.] // *Surface & Coatings Technology*. – 2021. – Vol. 421. – Article 127479.

11. *Using photoelectron spectroscopy to observe oxygen spillover to zirconia* / P. Lackner [et al.] // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2019. – Vol. 21. – P. 17613–17620.

12. *XPS-исследования межатомных взаимодействий в поверхностном слое многослойных наноструктур $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10}/a-Si)_{40}$ и $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10}/SiO_2)_{32}$* / Э.П. Домашевская [и др.] // *Физика твердого тела*. – 2014. – Т. 56. – С. 2219–2230.

13. *Ferrari, A.C. Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon* / A.C. Ferrari, J. Robertson // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 61. – P. 4095–4107.

14. *Tuinstra, F. Raman spectrum of graphite* / F. Tuinstra, J.L. Koenig // *Journal of Chemical Physics*. – 1970. – Vol. 53. – P. 1126–1130.

15. *Microstructure and high-temperature tribological properties of Si-doped hydrogenated diamond-like carbon films* / T.F. Zhang [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2018. – Vol. 435. – P. 963–973.

16. *Bonding structure and haemocompatibility of silicon-incorporated amorphous carbon* / S. Zhang [et al.] // *Thin Solid Films*. – 2006. – Vol. 515. – P. 66–72.

17. *Руденков, А.С. Влияние концентрации металла на фазовый состав, структуру и свойства углерод-металлических покрытий* / А.С. Руденков // *Проблемы физики, математики и техники*. – 2015. – № 3 (24). – С. 26–32.

18. *Пилипцов, Д.Г. Влияние термообработки на механические свойства слоистых углеродных покрытий* / Д.Г. Пилипцов // *Проблемы физики, математики и техники*. – 2021. – № 3 (48). – С. 29–37.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь в рамках НИР «Разработка реакционных ионно-плазменных методов формирования и параметризация покрытий на основе силицированного углерода и карбидообразующих металлов с высокими механическими свойствами и повышенной термостойкостью», комплексное задание 3.1.02 «Разработка устройств и процессов комбинированного электронно-ионного нанесения слоев и модифицирования поверхности для формирования функциональных покрытий» ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Электромагнитные, пучково-плазменные и литейно-деформационные технологии обработки и создания материалов».

Поступила в редакцию 15.09.2023.

Информация об авторах

Руденков Александр Сергеевич – к.т.н., доцент
Пилипцов Дмитрий Геннадьевич – к.т.н., доцент
Купо Александр Николаевич – к.т.н., доцент
Фролов Сергей Анатольевич – стажер мл.н.с.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК ДЛЯ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

С.А. Хахомов¹, А.В. Семченко¹, В.Е. Гайшун¹, Д.Л. Коваленко¹, В.В. Васькевич¹,
К.Д. Данильченко¹, А.А. Маевский¹, В.В. Малютина-Бронская²,
Ш.У. Юлдашев³, В. Верлан⁴

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника, Минск

³Центр Нанотехнологических разработок, Национальный университет Узбекистана, Ташкент

⁴Институт прикладной физики, Государственный университет Молдовы, Кишинев

LOW TEMPERATURE FORMING PROCESSES OF NANOCOMPOSITE FILMS FOR OPTOELECTRONICS

S.A. Khakhomov¹, A.V. Semchenko¹, V.E. Gaishun¹, D.L. Kovalenko¹, V.V. Vaskevich¹,
K.D. Danilchenko¹, A.A. Maevsky¹, V.V. Malyutina-Bronskaya²,
S.U. Yuldashev³, V. Verlan⁴

¹Francisk Skorina Gomel State University

²Optics, optoelectronics and laser technology, Minsk

³Center of Nanotechnologies Development, National University of Uzbekistan, Tashkent

⁴Institute of Applied Physics, State University of Moldova, Chisinau

Аннотация. Разработана методика синтеза золь-гель пленок ИТО с внедренными нанокристаллами $\text{ZnGa}_2\text{O}_4\text{:Cr}^{3+}$, Yb^{3+} (YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+}), проявляющими длительное послесвечение на поверхности фотоэлектрического солнечного элемента. Интенсивность люминесценции для золь-гель пленки с нанокристаллами $\text{ZnGa}_2\text{O}_4\text{:Cr}^{3+}$, Yb^{3+} имеет интенсивность на порядок ниже, чем для пленок ИТО с нанокристаллами YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+} . Применение метода Печини обеспечивает интенсивность люминесценции пленок ИТО с нанокристаллами YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+} в 4 раза выше, чем метод химического осаждения. Нанокристаллы вводились в матрицу на основе ИТО. $\text{In}_2\text{O}_3\text{:SnO}_2$ (ИТО) – полупроводник с шириной запрещенной зоны 3,0–4,3 эВ, обеспечивающий высокое пропускание в видимой области света. Тонкие пленки ИТО используются в оптоэлектронике и микроэлектронике в качестве прозрачного проводящего контакта для ряда оптоэлектронных продуктов, включая солнечные элементы, светодиоды, лазерные диоды и плоские дисплеи.

Ключевые слова: синтез пленок, золь-гель метод, тонкие пленки, солнечные элементы, функциональные структуры.

Для цитирования: Низкотемпературные процессы формирования наноконкомпозитных пленок для оптоэлектроники / С.А. Хахомов, А.В. Семченко, В.Е. Гайшун, Д.Л. Коваленко, В.В. Васькевич, К.Д. Данильченко, А.А. Маевский, В.В. Малютина-Бронская, Ш.У. Юлдашев, В. Верлан // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 48–52. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_48. – EDN: IRLYAF

Abstract. The technique for the synthesis of sol-gel ITO films with embedded $\text{ZnGa}_2\text{O}_4\text{:Cr}^{3+}$, Yb^{3+} (YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+}) nanocrystals exhibiting long-lasting afterglow on the surface of a photovoltaic solar cell has been developed. The luminescence intensity for a sol-gel film with $\text{ZnGa}_2\text{O}_4\text{:Cr}^{3+}$, Yb^{3+} nanocrystals is an order of magnitude lower than for ITO films with YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+} nanocrystals. The use of the Pechini method ensures the luminescence intensity of ITO films with YAGG:Cr^{3+} , Yb^{3+} nanocrystals is 4 times higher than the chemical deposition method. Nanocrystals were introduced into an ITO-based matrix. $\text{In}_2\text{O}_3\text{:SnO}_2$ (ITO) is a semiconductor with a band gap of 3.7–4.3 eV, providing high transmittance in the visible light region. ITO thin films are used in optoelectronics and microelectronics as a transparent conductive contact for a range of optoelectronic products, including solar cells, LEDs, laser diodes and flat panel displays.

Keywords: film synthesis, sol-gel method, thin films, solar cells, functional structures.

For citation: Low temperature forming processes of nanocomposite films for optoelectronics / S.A. Khakhomov, A.V. Semchenko, V.E. Gaishun, D.L. Kovalenko, V.V. Vaskevich, K.D. Danilchenko, A.A. Maevsky, V.V. Malyutina-Bronskaya, S.U. Yuldashev, V. Verlan // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 48–52. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_48 (in Russian). – EDN: IRLYAF

Введение

Прозрачные проводящие пленки (TCF) десятилетиями использовались в оптоэлектронных устройствах в качестве прозрачного проводника

из-за их высокого оптического пропускания и электропроводности. Каждый материал TCF имеет разные оптические и электрические свойства, которые определяют характеристики

© Хахомов С.А., Семченко А.В., Гайшун В.Е., Коваленко Д.Л., Васькевич В.В., Данильченко К.Д., Маевский А.А., Малютина-Бронская В.В., Юлдашев Ш.У., Верлан В., 2023

устройства: высокая прозрачность в сочетании с низким удельным сопротивлением, как у индия. Тонкие пленки ИТО используются в оптоэлектронике и микроэлектронике в качестве прозрачного проводящего контакта для ряда оптоэлектронных продуктов, включая солнечные элементы, светодиоды, лазерные диоды и плоские дисплеи.

Стойкие люминесцентные материалы можно использовать для повышения эффективности солнечных элементов. Этот тип люминесценции может длиться до нескольких часов, обычно при комнатной температуре, после прекращения действия источников возбуждения. Наиболее приемлемый механизм можно качественно объяснить процессом захвата-высвобождения электрона, который возбуждается ультрафиолетовым или видимым светом.

Введение нанокристаллов $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} и $YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+} с устойчивыми люминесцентными свойствами в золь ИТО при низкой температуре термообработки позволяет получить покрытия, проявляющие стойкое свечение на поверхности солнечного элемента, при этом покрытия имеют достаточную механическую стойкость для использования в солнечных батареях. Для получения таких покрытий нанокристаллы $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} и $YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+} вводились в состав пленок на основе оксида индия-олова (ИТО).

В данной статье представлена методика получения прозрачных проводящих золь-гель пленок, содержащих легирующие добавки. В качестве таких добавок выбраны нанокристаллы с длительным послесвечением различного состава.

1 Методика получения золь-гель пленок, содержащих нанокристаллы $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} ($YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+})

Нанокристаллы $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} ($YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+}) были получены следующим методом. Оксиды галлия (Ga_2O_3) и иттрия (Yb_2O_3) растворяли в азотной кислоте (HNO_3), а затем кипятили до полного выпаривания, после чего солевой остаток разводили в дистиллированной воде. В полученный прозрачный раствор добавляли растворы ацетата цинка ($Zn(O_2CCH_3)_2$) и нитрата хрома ($Cr(NO_3)_3 - 3H_2O$) и перемешивали в течении часа при температуре 65–70° С до получения прозрачного раствора. Данный раствор подвергали испарению и сушке при температуре 110° С до состояния ксерогеля. Ксерогель прокаливали в муфельной печи в течении пяти часов при температуре 800° С. Далее аморфный порошок отжигали в печи при температуре 1000° С десять часов. Полученный порошок нанокристаллов $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} ($YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+}) остужали и размалывали в мельнице до однородного состояния. Далее порошок нанокристаллов вводился в состав оксида индия-

олова. Схема получения нанокристаллов $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} приведена на рисунке 1.1.

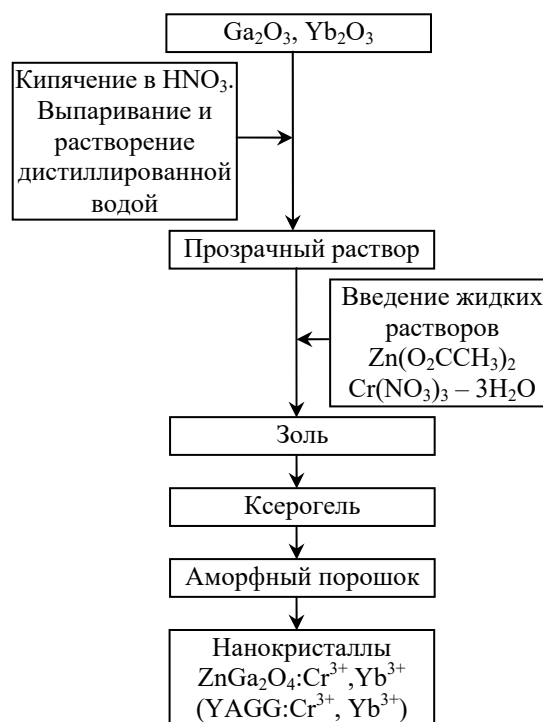


Рисунок 1.1 – Схема получения нанокристаллов $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}$, Yb^{3+} ($YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+})

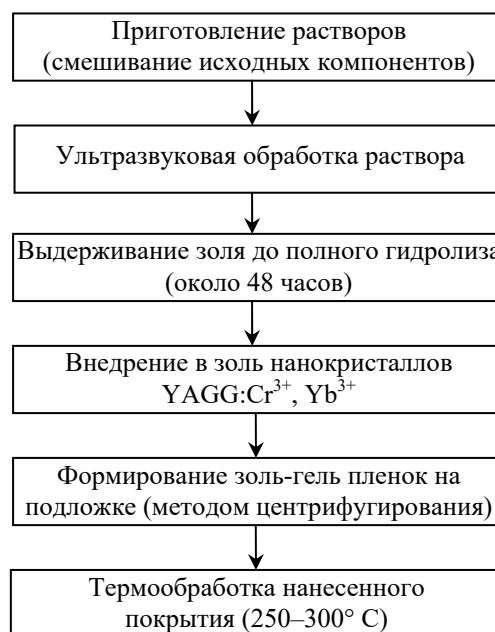


Рисунок 1.2. – Методика формирования золь-гель покрытий с введением нанокристаллов $YAGG:Cr^{3+}$, Yb^{3+}

Для приготовления состава оксида индия-олова (ИТО) использовались химически чистый хлористый ангидрид двухвалентного олова ($SnCl_2$), ацетат индия основной ($In(CH_3COO)_3$) и

изопропанол. На первой стадии SnCl_2 и $\text{In}(\text{CH}_3\text{COO})_3$ растворяли в изопропиловом спирте. Для однородного растворения прекурсоров раствор держали в ультразвуковой ванне до полного растворения. После этого золь выдерживался при комнатной температуре (около 20°C) в течение нескольких суток до полного гидролиза компонентов. Нанокристаллы $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$, Yb^{3+} ($\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}$, Yb^{3+}) внедрялись в золь в концентрации 5 масс. % после гидролиза основных компонентов, после чего состав наносился на поверхность солнечного элемента методом центрифугирования при скорости вращения подложки 6000 об/мин. Отжиг нанесенного покрытия проводился в муфельной печи при температуре $250\text{--}300^\circ\text{C}$ в течении 60 минут. Межслойный отжиг проводился при температуре 250°C . Состав был нанесен в количестве 5 слоев. Схема формирования золь-гель покрытий с нанокристаллами $\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}$, Yb^{3+} приведена на рисунке 1.2.

2 Результаты и обсуждение

На рисунке 2.1 показаны спектры пропускания (T) пленок ИТО, нанесенных на стеклянную подложку, содержащую разное количество слоев, отожженных при разных температурах.

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

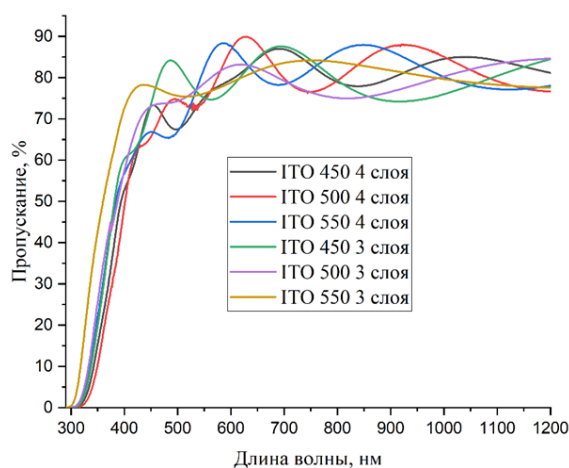


Рисунок 2.1 – Спектры пропускания слоев ИТО

На рисунке 2.2 представлены значения удельного поверхностного сопротивления различных покрытий в зависимости от параметров

их изготовления (температуры отжига и толщины пленок).

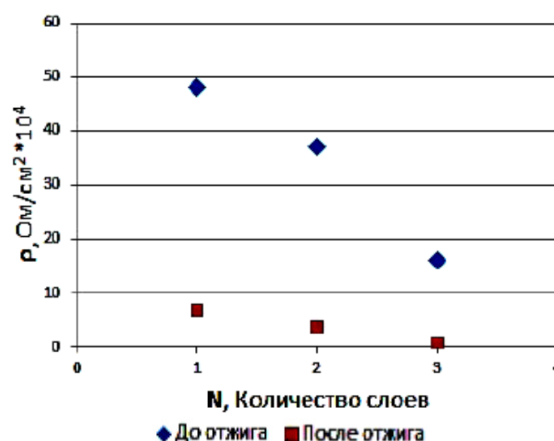


Рисунок 2.2 – Удельное сопротивление слоев ИТО в зависимости от температуры отжига и толщины слоя

Из рисунка 2.2 видно, что увеличение числа слоев и повышение температуры отжига приводят к незначительному снижению удельного поверхностного сопротивления. Заметное снижение удельного поверхностного сопротивления наблюдается при увеличении количества слоев и при дополнительном вакуумном отжиге при температуре 350°C . Дополнительный отжиг в вакууме при температуре 350°C приводит к уплотнению пленки и, как следствие, к уменьшению удельного поверхностного сопротивления.

На рисунке 2.3 представлены типичные АСМ-изображения поверхности образца ИТО (топография, фазовый контраст, зернистость), площадь сканирования 4×4 мкм.

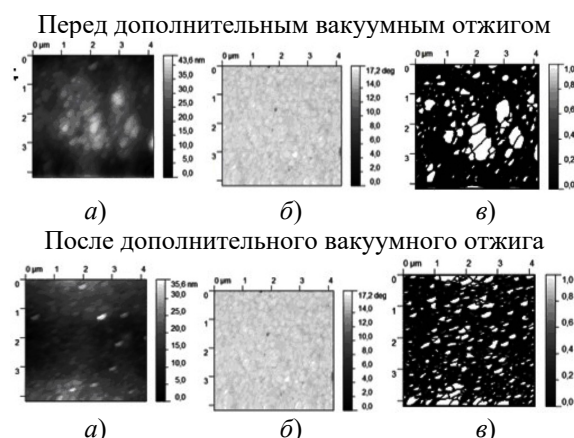


Рисунок 2.3 – АСМ-изображения поверхности образца ИТО: а) топография, б) – фазовый контраст, в) зернистость

Слой ИТО образован равномерно распределенными сферическими зёрнами с четкими границами между ними. Перед дополнительным ва-

куумным отжигом на поверхности многослойной пленки ИТО формируется плотный слой с характерным размером зерна 120 нм и субшероховатостью 5,5 нм. Для сравнения отметим, что субшероховатость слоя образца ИТО (6 слоев) на полированной поверхности кремния не превышает 3 нм. После дополнительного вакуумного отжига структура уплотняется, размер зерна уменьшается до 70 нм, а субшероховатость до 4,2 нм, что хорошо согласуется с измерениями удельного сопротивления. Синтезированные слои обладали высокой адгезией к поверхности подложек.

На рисунках 2.4–2.6 представлены спектры люминесценции композитов с нанокристаллами $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ ($\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$). Порошки, изготовленные методом Печини, характеризуются более интенсивной люминесценцией в диапазонах 510–580 нм и 700–750 нм, что, по-видимому, объясняется более сильной связью иона активатора с матрицей. Повышение концентрации легирующих нанокристаллов выше 0,5 масс. % снижало пропускание золь-гель пленки ниже чем до 80%, что является неприемлемым для прозрачного проводящего электрода.

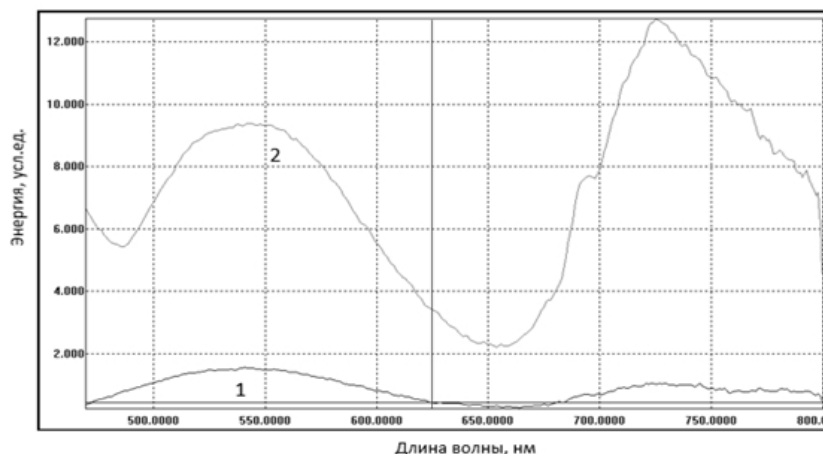


Рисунок 2.4 – Спектры люминесценции пленок ИТО с нанокристаллами $\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ (химическое осаждение): $\lambda_{\text{возб}} = 325$ нм (1); $\lambda_{\text{возб}} = 435$ нм (2)

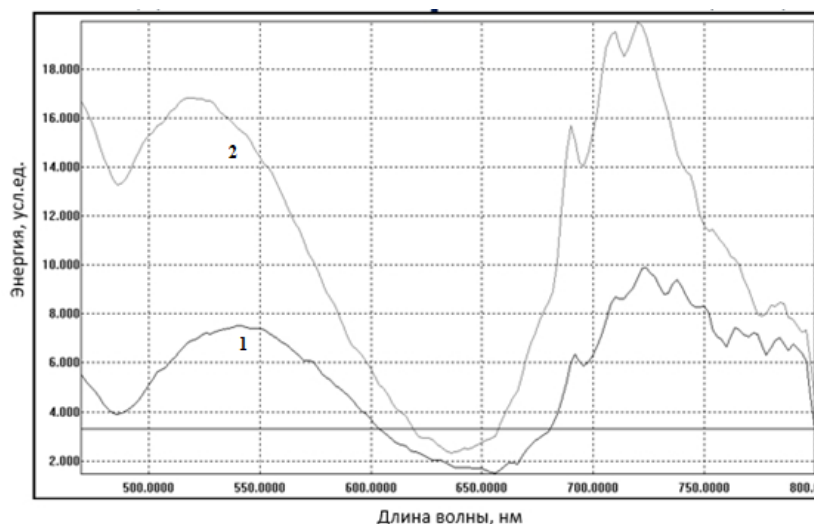


Рисунок 2.5 – Спектры люминесценции пленок ИТО с нанокристаллами $\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ ($\lambda_{\text{возб}} = 435$ нм): химическое осаждение (1); Печини (2)

На рисунке 2.6 показаны спектры люминесценции при отжиге пленки на температурах 700, 800 и 900° С. Из графика видно, что при увеличении температуры отжига растет интенсивность люминесценции композитов с нанокристаллами $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$. Интенсивность люминесценции для золь-гель пленки с нанокристаллами $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ имеет интенсивность на по-

рядок ниже, чем для пленок ИТО с нанокристаллами $\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$. Метод Печини обеспечивает интенсивность люминесценции пленок ИТО с нанокристаллами $\text{YAGG}:\text{Cr}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ в 4 раза выше, чем метод химического осаждения.

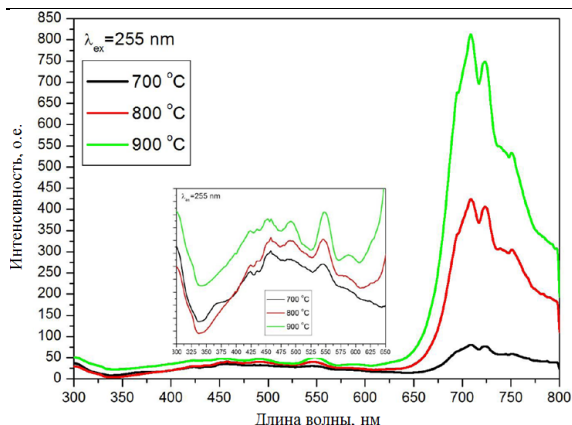


Рисунок 2.6 – Спектры люминесценции золь-гель пленок ИТО с нанокристаллами $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}, Yb^{3+}$: $\lambda_{возб} = 255$ нм

Ниже, на рисунке 2.7, представлены солнечные элементы с нанесенными на них люминесцентными покрытиями.

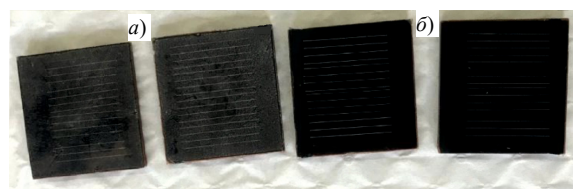


Рисунок 2.7 – Солнечные элементы с (а) и без люминесцентного покрытия (б)

При удалении внешнего источника света солнечные элементы с дополнительно нанесенным люминесцентным покрытием ИТО с нанокристаллами $YAGG:Cr^{3+}, Yb^{3+}$ сохраняли остаточное напряжение до 0,5 В в течение 30–60 минут.

Заключение

Разработана методика синтеза золь-гель пленок ИТО:С с внедренными нанокристаллами $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}, Yb^{3+}$ ($YAGG:Cr^{3+}, Yb^{3+}$), проявляющими длительное послесвечение на поверхности фотоэлектрического солнечного элемента. Повышение концентрации легирующих нанокристаллов выше 0,5 масс. % снижало пропускание золь-гель пленки ниже чем до 80%, что является неприемлемым для прозрачного проводящего электрода. При увеличении температуры отжига до 900 °С интенсивность люминесценции композитов с нанокристаллами $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}, Yb^{3+}$ возрастала. Интенсивность люминесценции для золь-гель пленки с нанокристаллами $ZnGa_2O_4:Cr^{3+}, Yb^{3+}$ имеет интенсивность на порядок ниже, чем для пленок ИТО с нанокристаллами $YAGG:Cr^{3+}, Yb^{3+}$. Применение метода Печини обеспечивает интенсивность люминесценции пленок ИТО с нанокристаллами $YAGG:Cr^{3+}, Yb^{3+}$ в 4 раза выше, чем метод химического осаждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Золь-гель слои на основе ИТО для применения в оптоэлектронике и солнечной энергетике / А.В. Семченко [и др.] // Беларусь – Узбекистан: формирование рынка инновационной продукции. – 2023. – Т. 1. – С. 293–296.

2. Исследование физических свойств композиционных антистатических покрытий, синтезированных золь-гель методом / К.Д. Данильченко [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (53). – С. 21–24.

3. Suer, B. Conducting fluorine doped tin dioxide (FTO) coatings by ultrasonic spray pyrolysis for heating applications / B. Suer, M. Ozenbas // Ceramics International. – 2021. – Т. 47, № 12. – С. 17245–17254.

4. Investigation of the Structural and Optical Properties of Silicon-Perovskite Structures with a Black Silicon Layer / G.Y. Ayvazyan [et al.] // Journal of Contemporary Physics. – 2022. – Vol. 57, № 3. – P. 274–279.

5. Photoactive Properties of Transport Sol-Gel Layers Based on Strontium Titanate for Perovskite Solar Cells / A.V. Semchenko [et al.] // Photonics. – 2023. – Vol. 10. – P. 845. – DOI: <https://doi.org/10.3390/photonics10070845>.

6. Nanoscale Piezoelectric Properties and Phase Separation in Pure and La-Doped $BiFeO_3$ Films Prepared by Sol-Gel Method / A.V. Semchenko [et al.] // Materials. – 2021. – Vol. 14. – P. 1694. – DOI: <https://doi.org/10.3390/ma14071694>.

7. Sidsky, V.V. Photoactive and Structure Properties of $ZnO:XMgO$. Nanocomposite sol-gel films on the surface of silicon / V.V. Sidsky, V.V. Malyutina-Bronskaya (eds.) // In: Research and Education: Traditions and Innovations. INTER-ACADEMIA 2021. Lecture Notes in Networks and Systems. – Springer, Singapore. – 2022. – Vol. 422. – P. 227–235. – DOI: https://doi.org/10.1007/978-981-19-0379-3_23.

8. Malyutina-Bronskaya, V.V. Structural, optical and photoelectric properties of Tb doped ZnO thin films for device applications / V.V. Malyutina-Bronskaya // Optical Materials. – 2022. – Vol. 127, № 60. – P. 112305. – DOI: [10.1016/j.optmat.2022.112305](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112305).

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проекты T22УЗБ-074 и T22МЛД-003 и НАЦР Республики Молдова, проекты 20.80009.5007.14, 22.80013.5007.6В1.

Поступила в редакцию 04.09.2023.

Информация об авторах

Хахомов Сергей Анатольевич – д.ф.-м.н., доцент
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Гайшун Владимир Евгеньевич – к.ф.-м.н., доцент
Коваленко Дмитрий Леонидович – к.ф.-м.н., доцент
Васьюкевич Василий Васильевич – ст. преподаватель
Данильченко Константин Дмитриевич – мл. науч. сотр.
Маевский Александр Артурович – мл. науч. сотрудник
Малютина-Бронская Виктория Владимировна – науч. сотр.
Юлдашев Шавкат Узгенович – д.ф.-м.н., профессор
Верлан Виктор Ион – д.ф.-м.н.

УДК 537.533.7:621.793.18:678.746.47

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_53

EDN: NNLVFW

СИНТЕЗ И СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИЭТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ, ИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ

М.А. Ярмоленко¹, Цзян Сяо Хун², А.А. Рогачев³, А.В. Рогачев¹,
А.С. Руденков¹, С.А. Фролов¹, А.М. Михалко¹

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

²Нанкинский университет науки и технологии

³ГНУ «Институт химии новых материалов Национальной Академии Наук Беларуси»

SYNTHESIS AND SORPTION PROPERTIES OF COATINGS BASED ON HYDROXYETHYL CELLULOSE INTERCALATED FROM THE GAS PHASE WITH ANTIBACTERIAL COMPOUNDS

M.A. Yarmolenko¹, Jiang Xiao Hong², A.A. Rogachev³, A.V. Rogachev¹,
A.S. Rudenkov¹, S.A. Frolov¹, A.M. Mikchalko¹

¹Francisk Skorina Gomel State University

²Nanjing University of Science and Technology

³SSI «Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus»

Аннотация. Установлена высокая эффективность применения метода электронно-лучевого диспергирования при осаждении однокомпонентных и композиционных покрытий на основе гидроксиэтилцеллюлозы и октенидина, определена их молекулярная структура и свойства. Молекулярная структура покрытия на основе гидроксиэтилцеллюлозы содержит более высокую концентрацию C–O, C–C (sp³), C–OH связей в сравнении со структурой исходного органического соединения. Покрытие характеризуется высокой скоростью и монотонным характером высвобождения октенидина в водную среду.

Ключевые слова: электронно-лучевое диспергирование, покрытие, гидроксиэтилцеллюлоза, октенидин, структура, свойства.

Для цитирования: Синтез и сорбционные свойства покрытий на основе гидроксиэтилцеллюлозы, интеркалированных из газовой фазы антибактериальным соединением / М.А. Ярмоленко, Цзян Сяо Хун, А.А. Рогачев, А.В. Рогачев, А.С. Руденков, С.А. Фролов, А.М. Михалко // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 53–59. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_53. – EDN: NNLVFW

Abstract. The high efficiency of using the electron beam dispersion method in the deposition of single-component and composite coatings based on hydroxyethylcellulose and octenidine was established, and their molecular structure and properties were determined. In the outer layers, the coating contains a higher concentration of C–O, C–C (sp³), C–OH bonds in comparison with the structure of the original organic compound. The coating is characterized by high speed and monotonous dissolution of octenidine in solutions.

Keywords: electron beam dispersion, coating, hydroxyethylcellulose, octenidine, structure, properties.

For citation: Synthesis and sorption properties of coatings based on hydroxyethyl cellulose intercalated from the gas phase with antibacterial compounds / M.A. Yarmolenko, Jiang Xiao Hong, A.A. Rogachev, A.V. Rogachev, A.S. Rudenkov, S.A. Frolov, A.M. Mikchalko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 53–59. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_53 (in Russian). – EDN: NNLVFW

Введение

Разработка новых составов и технологий формирования функциональных материалов, применяемых в качестве элементов имплантатов, является одним из активно развиваемых в последнее время направлений исследований. Использование в качестве основы композиционных материалов медицинского назначения природных, легко деградируемых в человеческом организме соединений, позволяет реализовать

комплекс свойств, определяющий их высокий лечебный эффект. В числе таких перспективных материалов следует отметить покрытия на основе модифицированной целлюлозы, содержащие антибактериальные препараты [1]. В частности, перспективно применение слоев гидроксиэтилцеллюлозы (ГЭЦ), которая в биологических средах полностью разлагается без образования токсичных для живых существ промежуточных продуктов биохимических реакций [2]. При этом

гидроксиэтилцеллюлоза проявляет гипоаллергенные свойства и эффективно используется при гидрофилизации [3]. Данное соединение хорошо растворяется в воде, однако формирование на его основе композиционных высокодисперсных материалов, содержащих гидрофобные лекарственные препараты, растворными методами не представляется возможным. В связи с этим выбор и обоснование технологических приемов формирования таких слоев с заданными дисперсностью и распределением ингредиентов представляет практический и научный интерес.

При формировании композиционных материалов путем осаждения из активной газовой фазы ограничения, связанные с различием химических, теплофизических, термодинамических свойств компонентов не являются определяющими [4]. Высокая универсальность данного метода достигается переводом молекулярных образований заданных веществ в летучее состояние, их активацией и последующим осаждением на поверхности с образованием конденсированных слоев. Структура, состав осажденных покрытий регулируются достаточно эффективно путем изменения условий и режима энергетического воздействия на стадии генерации летучих продуктов, их переноса в газовой среде, осаждения на поверхности. При этом исключается применение жидких сред, являющихся источником загрязнений.

Основной целью настоящей работы является оценка эффективности электронно-лучевого осаждения композиционных покрытий на основе гидроксиэтилцеллюлозы и октенидина, определение их молекулярной структуры.

1 Методика формирования покрытий и исследования

Формирование композиционных покрытий на основе ГЭЦ и октенидина проводилось методом электронно-лучевого диспергирования с помощью устройства и методики, представленных в [5], [6]. Из-за ограниченной растворимости октенидина осаждение таких композиционных покрытий из раствора не осуществимо. В качестве мишеней были использованы порошки гидроксиэтилцеллюлозы и смеси ее с октенидином с массовым содержанием 1:1.

В процессе нанесения покрытия регистрировали изменение давления в вакуумной камере (начальное давление составляло $2 \cdot 10^{-3}$ Па) и скорость роста тонкого слоя с помощью кварцевого измерителя. Изменение условий генерации летучих продуктов электронно-лучевого диспергирования осуществляли в одном технологическом цикле путем варьирования тока накала электронной пушки и величины ускоряющего напряжения.

Молекулярную структуру нанесенных покрытий определяли методом ИК-спектроскопии на ИК-Фурье спектрофотометре Vertex-70 (Bruker) с использованием стандартной МНПВО

приставки (многократное нарушенное полное внутреннее отражение). При реализации данной методики покрытия из продуктов диспергирования осаждались на пленки металлизированного лавсана. Численная обработка спектров осуществлялась с помощью программы OPUS.

Анализ химической структуры и элементного состава покрытий проводили методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Измерения осуществляли на XPS-микросонде PHI Quantera II Scanning XPS с использованием Al K α в качестве источника монохроматического рентгеновского излучения ($h\nu = 1486,6$ эВ). РФЭС исследования выполняли при следующих параметрах: 1) угол эмиссии электронов – 45° ; 2) область анализа составляла $100 \text{ мкм} \times 100 \text{ мкм}$; 3) давление при проведении РФЭС-анализа соответствовало $1,9 \cdot 10^{-7}$ Па. РФЭС анализ проводили с учетом рекомендаций, представленных в работах [7], [8]. Перед измерением образцы подвергали травлению ионами аргона для очистки поверхности покрытий от постороннего углерода. Параметры травления: время – 1 мин, ускоряющее напряжение – 2 кВ, угол падения – 45° . Травление необходимо для очистки поверхности покрытия от постороннего углерода. Полосы РФЭС-спектров были обработаны с помощью приложения OPUS. Для удаления фонового вклада использован метод Ширли. Аппроксимацию фотоэлектронных линий производили с помощью функции Гаусса.

ЯМР ^1H спектры порошка ГЭЦ и покрытия на его основе получали с использованием спектрометра Bruker Avance 400 МГц. Растворителем являлся диметилсульфоксид.

Кинетику высвобождения октенидина из композиционного покрытия в физиологический раствор устанавливали по методике, приведенной в [9].

2 Результаты исследования и их обсуждение

На начальных стадиях воздействия потока электронов на мишень с ГЭЦ и ее смеси регистрируется оплавление порошка. На данной стадии отсутствует заметное изменение давления в вакуумной камере, кварцевый измеритель толщины не фиксирует начало процесса нанесения покрытия (рисунок 2.1). Данные об изменении давления в вакуумной камере и скорости роста, полученные при диспергировании мишеней при ускоряющем напряжении 1000 и 500 В и токе накала 10 А, свидетельствуют о практически линейной зависимости параметров нанесения от мощности потока электронов. Характер изменения давления и скорости роста покрытий, в частности, отсутствие индукционного начального периода, резкое снижение процесса генерации летучих продуктов диспергирования при выключении источника электронов указывают на преимущественно нетепловой механизм генерации летучих продуктов диспергирования.

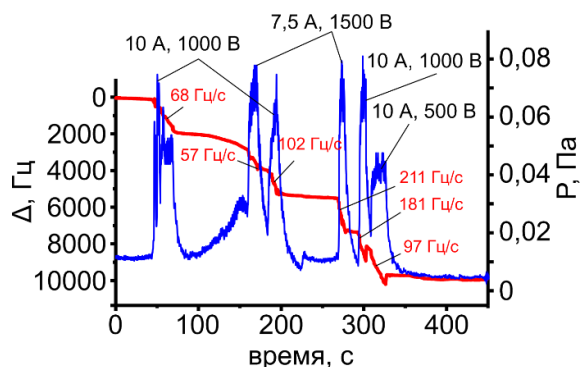


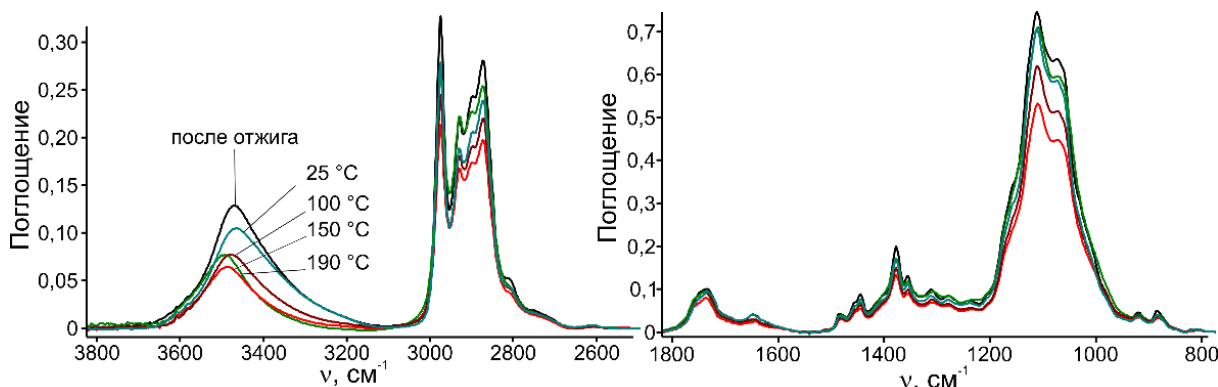
Рисунок 2.1 – Кинетические зависимости давления в камере и скорости роста покрытий при различных режимах электронно-лучевого диспергирования порошка ГЭЦ

Анализ ИК-спектров покрытий на основе ГЭЦ, представленных на рисунке 2.2, показывает, что их молекулярная структура имеет много общего со структурой покрытий на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ) [9].

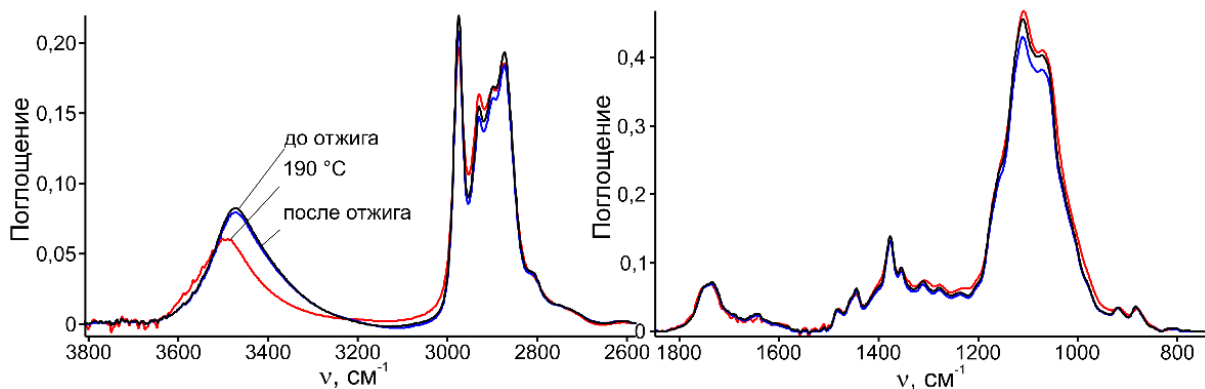
При этом тонкий слой на основе ГЭЦ в сравнении с МКЦ не обладает способностью микрокристаллической целлюлозы интенсивно сорбировать влагу из атмосферы воздуха. На это указывают невысокие значения оптической плотности полосы в интервале $3700\text{--}3000\text{ см}^{-1}$

(валентные колебания ОН-групп). В области волновых чисел $3000\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ проявляются валентные колебания С–Н связей: полоса при $2975\text{ (} -\text{OC}_2\text{H}_5\text{)}$, $2898, 2800\text{ см}^{-1}$ – CH_3 , при 2930 см^{-1} – CH_2 , при 2873 см^{-1} – CH (третичный) [10], [11]. В интервале $1200\text{--}900\text{ см}^{-1}$ – валентные колебания С–О, С–О–С, С–С, С–ОН связей. Наибольшее значение оптической плотности в интервале $1200\text{--}900\text{ см}^{-1}$ характерно для валентных колебаний С–О–С связей (1111 и 1070 см^{-1}).

Нагрев покрытия сопровождается десорбцией молекул адсорбированной влаги. На это указывает снижение оптической плотности полос поглощения в области колебаний гидроксильных групп ($3700\text{--}3000\text{ см}^{-1}$) и при 1640 см^{-1} (деформационные колебания молекул воды). Помимо десорбции влаги регистрируется протекание процессов деструкции тонкого покрытия: постепенное повышение температуры до 150°C сопровождается монотонным снижением оптической плотности всех полос поглощения в ИК-спектре. При температуре нагрева 190°C фиксируется рост поглощения во всем диапазоне волновых чисел ИК-спектра покрытия. Исключением является область ($3700\text{--}3000\text{ см}^{-1}$) и полоса при 1640 см^{-1} . Рост поглощения может быть связан с возникновением межмолекулярных сшивок (эфирные связи) с участием этанольных заместителей.



а) один цикл нагрева (нагрев от 25°C до 190°C и последующее охлаждение до 25°C)



б) два цикла нагрева

Рисунок 2.2 – ИК-спектры покрытия на основе ГЭЦ

Следует отметить, нагрев до 190°C покрытий на основе микрокристаллической целлюлозы сопровождается разрушением эфирных связей и пиранозных циклов. Влияние кислорода может проявляться в повышении интенсивности поглощения C – H связей в ИК-спектре. В частности, в работе [11] отмечено, что ацетилирование сопровождается повышением интенсивности полосы при 1380 см⁻¹.

При повторном отжиге было зафиксировано снижение оптической плотности всех полос поглощения. Результат косвенно подтверждает вывод об образовании сшитой структуры.

Проведено определение молекулярной структуры покрытий на основе ГЭЦ с помощью РФЭС (рисунок 2.3). Полосу C 1s раскладывали на оставляющие полосы в соответствии с молекулярной структурой ГЭЦ: 284,7 эВ – C – C (sp²); 285,5 эВ – C – O, C – C (sp³), C – OH; 286,4 эВ – C – O / C – OH [12]–[14]; 287,3 эВ – C = O [15], [16]; 288,5 эВ – C = O / –COOH [16], [17]; 289,5 эВ – O – C = O [18]–[20].

Молекулярная структура покрытия на основе ГЭЦ характеризуется более высоким содержанием C – O, C – C (sp³), C – OH связей в сравнении со структурой исходного органического соединения. Результат может быть следствием разрушения молекул ГЭЦ с последующим окислением углеводородных фрагментов. Содержание C – C (sp²) связей в молекулярной структуре покрытия не отличается от содержания аналогичных связей в структуре исходного ГЭЦ. Таким образом, воздействие потока электронов не сопровождается возникновением ненасыщенных

C = C связей и ароматических структур в осаждаемом покрытии. Следует отметить, что в процессе электронно-лучевого воздействия цвет порошка ГЭЦ в мишени меняется с белого на черный, что указывает на ее карбонизацию. Поэтому при нанесении покрытия на более поздней стадии в молекулярной структуре наблюдается рост C – C (sp³) связей. Ранее уже было отмечено, что образование ароматических структур в мишени не характерно для процесса электронно-лучевого диспергирования ГЭЦ в вакууме.

Наиболее заметным отличием структуры покрытия от структуры исходного соединения является более низкое содержание в тонком слое C = O связей. Высокое содержание карбонильных групп в структуре порошка может быть обусловлено технологическими особенностями синтеза ГЭЦ, присутствием следовых количеств низкомолекулярных фрагментов химических реагентов. При воздействии потока электронов на порошок ГЭЦ такие соединения легко десорбируются и удаляются системой откачки.

Представленные на рисунке 2.3 РФЭС спектры позволяют провести анализ структуры покрытия по толщине. Видно, что химический состав мишени при нанесении непрерывно меняется. Так, верхний слой покрытия сформирован фрагментами, образованными при наиболее длительном воздействии потока электронов на ГЭЦ. По этой причине содержание C – C (sp²) связей на поверхности покрытия выше, чем вблизи подложки. При этом молекулярная структура покрытия, в целом, является относительно однородной по толщине. Это может быть связано

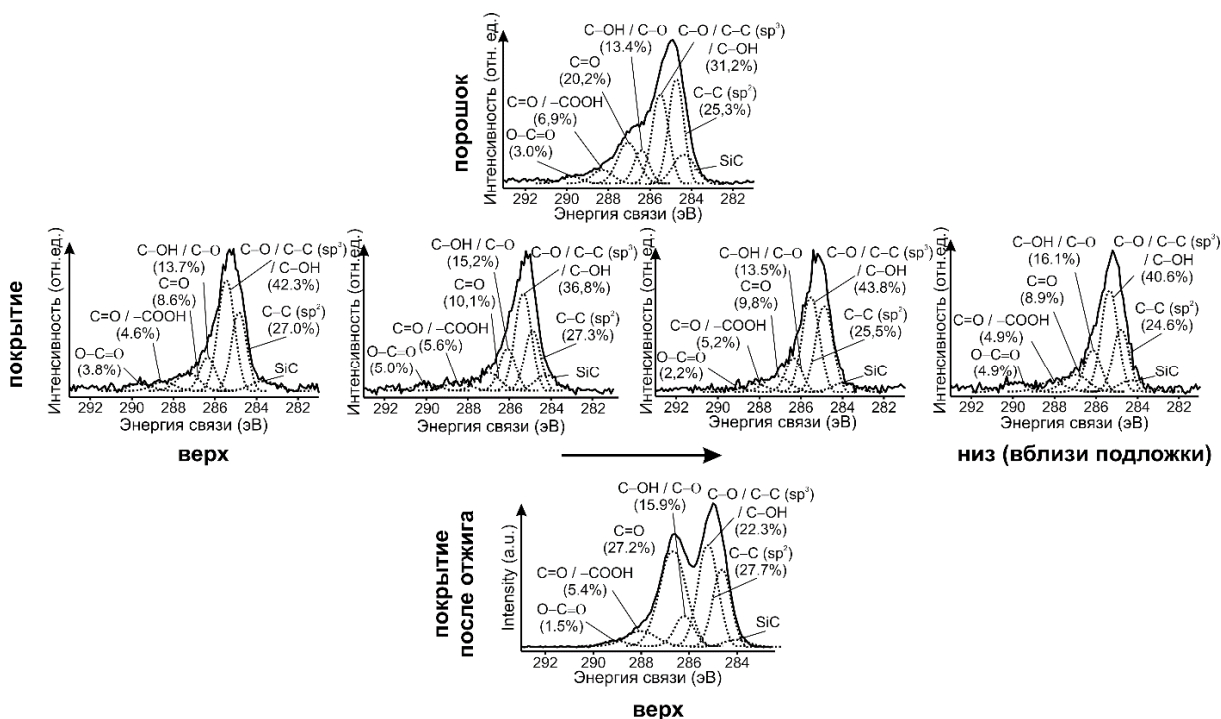


Рисунок 2.3 – РФЭС спектры ГЭЦ

с тем, что низкомолекулярные фрагменты деструкции порошка ГЭЦ не способны конденсироваться на подложке. Образование низкомолекулярных фрагментов деструкции ГЭЦ происходит при длительном воздействии потока электронов на органическое соединение.

Отжиг сопровождается частичной деструкцией молекулярной структуры покрытия, которая является причиной изменения концентрации пиранозных циклов, эфирных связей и этанольных заместителей. Деструкция сопровождается также последующим окислением углеводородных фрагментов. Косвенно на это указывает рост содержания C=O связей. Отметим, что данные результаты согласуются с данными ИК-спектроскопии.

Анализ результатов ¹H ЯМР спектроскопии, представленных на рисунке 2.4, показывает, что отличия спектров исходной ГЭЦ и покрытия фиксируются в области 3,3–3,2 ppm, 2,1–1,3 ppm.

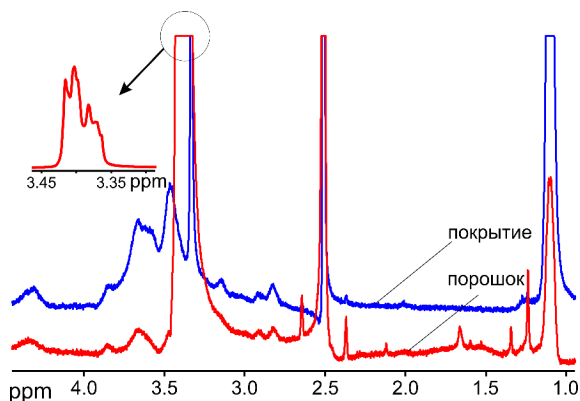
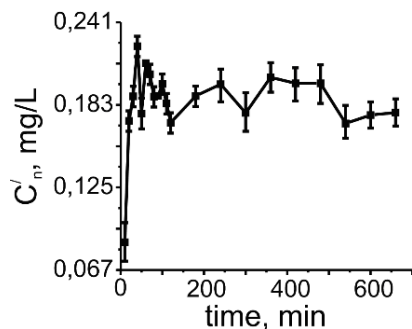
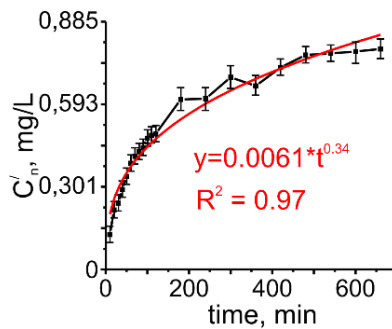


Рисунок 2.4 – ¹H ЯМР спектры ГЭЦ

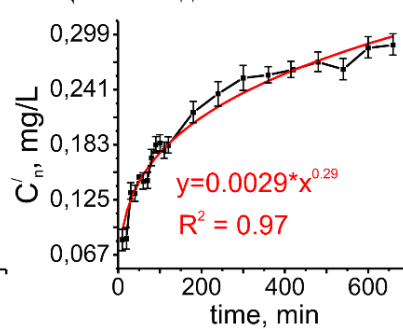
Широкие пики между 3,20 и 3,30 ppm были приписаны сигналам трех протонов (H2, H3 и H4) в ангидрогликозных единицах (AGU). В ¹H ЯМР спектре покрытия отсутствуют полосы при 2,1, 1,6 и 1,3 ppm, которые могут быть соотнесены с протонами метиленовых, метильных, ацетатных и эфирных групп боковых заместителей [21]–[23]. Результаты ¹H ЯМР спектроскопии также указывают на частичную деструкцию пиранозных циклов и боковых заместителей (–CH₂CH₂OH).



а) покрытие октенидина;



б) – покрытие ГЭЦ + октенидин;



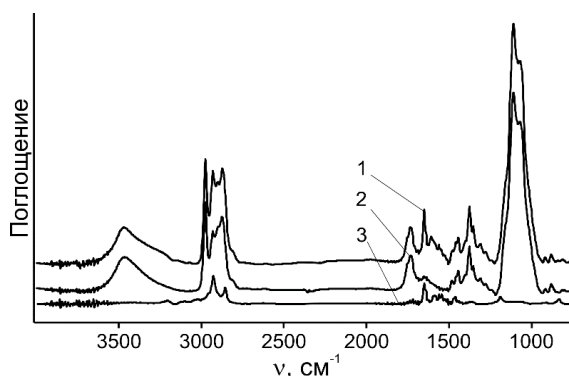
в) – покрытие (ГЭЦ + поликапролактон) + октенидин

Рисунок 2.6 – Изменение концентрации октенидина в физиологическом растворе

Согласно данным ЯМР спектроскопии, воздействие потока электронов на ГЭЦ не сопровождается интенсивной деструкцией молекулярной структуры высокомолекулярного соединения.

В ИК-спектре композиционного покрытия на основе ГЭЦ и октенидина присутствуют все полосы поглощения, характерные для исходных компонентов мишени (рисунок 2.5). По этой причине композиционный слой можно рассматривать как высокодисперсную механическую смесь исходных компонентов.

Характер межфазного взаимодействия в значительной степени определяет особенности высвобождения антибактериальных лекарственных компонентов из композиционного слоя (рисунок 2.6). Если при нахождении покрытия октенидина после двух часов нахождения покрытия в физиологическом растворе концентрация октенидина выходит на «плато» и в течение последующих 9 часов фиксируются периодические изменения концентрации относительно установившегося значения «насыщения», то при введении октенидина в матрицу гидроксиэтилцеллюлозы характер высвобождения существенно изменяется: концентрация препарата монотонно повышается в процессе выдержки в растворе. При описании кинетики высвобождения октенидина из композиционного слоя моделью Peppas-Korsmeyer показатель экспоненты $n = 0,29$.



- 1 – покрытие ГЭЦ + октенидин;
- 2 – покрытие на основе ГЭЦ;
- 3 – покрытие на основе октенидина;

Рисунок 2.5 – ИК-спектры покрытий на основе ГЭЦ и октенидина

Монотонное высвобождение октенидина в водную среду с показателем экспоненты в модели Peppas – Korsmeyer $n = 0,29$ фиксируется и из композиционного покрытия (ГЭЦ + поликапролактон) + октенидин (рисунок 2.6, в). При этом скорость высвобождения лекарственного соединения заметно ниже скорости его высвобождения из тонкого слоя на основе ГЭЦ + октенидин. Отмеченное может быть связано со структурой композиционного слоя, а также с особенностями процесса электронно-лучевого диспергирования многокомпонентной смеси. Наличие сильного межмолекулярного взаимодействия (водородных связей) между фрагментами органических высокомолекулярных соединений препятствует быстрому высвобождению лекарства.

Заключение

Определены закономерности формирования покрытий гидроксипропилцеллюлозы и композиционных слоев на ее основе и октенидина методом электронно-лучевого диспергирования, их молекулярная структура и свойства. Установлено, что при воздействии потока низкоэнергетических электронов на ГЭЦ регистрируется квазистационарная генерация летучих продуктов, давление в камере и скорость осаждения которых практически линейно зависит от мощности потока электронов. Осажденные слои имеют молекулярную структуру близкую к структуре исходных соединений. В покрытиях отмечается наличие межмолекулярных швов с участием этанольных заместителей, окисление углеводородных фрагментов. При этом электронно-лучевое воздействие не сопровождается возникновением ненасыщенных C = C связей и ароматических структур. Покрытия по своему химическому составу являются достаточно однородными по толщине. Во внешних слоях покрытие содержит более высокую концентрацию C–C (sp^3) связей. Термическая обработка тонкого слоя сопровождается формированием сшитой структуры.

Композиционные покрытия ГЭЦ + октенидин в отличие от однокомпонентных слоев октенидина характеризуются высокой скоростью и монотонным характером растворения октенидина в водных средах. Монотонное высвобождение октенидина в водную среду фиксируется и из композиционного покрытия (ГЭЦ + поликапролактон) + октенидин. При этом скорость высвобождения лекарственного соединения заметно ниже скорости его высвобождения из тонкого слоя на основе ГЭЦ + октенидин, что свидетельствует о проявлении более сильного межмолекулярного взаимодействия (образовании водородных связей) между фрагментами органических высокомолекулярных соединений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Functionalization and Antibacterial Applications of Cellulose-Based Composite Hydrogels* / Y. Bao,

J. He, K. Song, J. Guo, X. Zhou, S. Liu // *Polymers*. – 2022. – Vol. 14. – P. 769. – DOI: <https://doi.org/10.3390/polym14040769>.

2. *Design and characterization of an antibacterial film composited by hydroxyethyl cellulose (HEC), carboxymethyl chitosan (CMCS), and nano ZnO for food packaging* / C. Cen, F. Wang, Y. Wang, H. Li, L. Fu, Y. Li, J. Chen, Y. Wang // *International Journal of Biological Macromolecules*. – 2023. – Vol. 231. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.123203>.

3. *Temperature and oxidation-responsive ion pair self-assembly composed of hydroxyethyl cellulose ethoxylate and phenylthio acetic acid* / K. Wangpimool, K. Rana, J.-C. Kim // *Cellulose*. – 2023. – Vol. 30. – P. 7591–7606. <https://doi.org/10.1007/s10570-023-05375-6>.

4. *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, X. Qin, A.V. Rogachev, A.A. Rogachev, I.I. Kontsevaya, A.E. Pyzh, Xiaohong Jiang, V.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko // *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications*. – 2021. – № 2. – P. 100146. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carpta.2021.100146>.

5. *Pyzh Low-energy electron beam deposition of coatings based on lignin and quercetin, their structure and properties* / Y. Liu, J. Cao, A.V. Rogachev, A.A. Rogachev, I.I. Kontsevay, Xiaohong Jiang, V.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko, D.L. Gorbachev, A.E. // *Vacuum*. – 2022. – Vol. 205. – 111416.

6. *Low-energy electron beam deposition of metal-containing organic-inorganic coatings with selective activity against microorganisms* / Y. Liu, A.V. Rogachev, Xiaoxue Tana, A.A. Rogachev, Xiaohong Jiang, A.E. Pyzh, V.A. Yarmolenko, M.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov // *Vacuum*. – 2023. – Vol. 209. – P. 111803.

7. *XPS guide: Charge neutralization and binding energy referencing for insulating samples* / D.R. Baer, K. Artyushkova, H. Cohen, C.D. Easton, M. Engelhard, T.R. Gengenbach, G. Greczynski, P. Mack, D.J. Morgan, A. Roberts // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. – 2020. – № 38. – P. 031204. – DOI: <https://doi.org/10.1116/6.0000057>.

8. *Greczynski, G. A step-by-step guide to perform x-ray photoelectron spectroscopy* / G. Greczynski, L. Hultman // *J. Appl. Phys.* – 2022. – № 132. – P. 011101. – DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0086359>.

9. *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, X. Qin, A.V. Rogachev, A.A. Rogachev, I.I. Kontsevaya, A.E. Pyzh, Xiaohong Jianga, V.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko // *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications*. – 2021. – № 2. – P. 100146. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carpta.2021.100146>.

10. Bellamy, L.J. The Infra-red Spectra of Complex Molecules. Front Cover / L.J. Bellamy. – Methuen. Molecular spectra. – 1954. – 323 p.
11. Nakanishi, K. Infrared Absorption Spectroscopy / K. Nakanishi. – Tokyo Kyoiku University. Holden-Day, Inc., San Francisco, 1962. – 233 p.
12. *Low-energy electron beam deposition of coatings based on lignin and quercetin, their structure and properties* / Y. Liu, J. Cao, A.V. Rogachev, A.A. Rogachev, I.I. Kontsevay, Xiaohong Jiang, V.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov, M.A. Yarmolenko, D.L. Gorbachev, A.E. Pyzh // *Vacuum*. – 2022. – Vol. 205. – P. 111416.
13. *Low-energy electron beam deposition of metal-containing organic-inorganic coatings with selective activity against microorganisms* / Y. Liu, A.V. Rogachev, Xiaoxue Tana, A.A. Rogachev, Xiaohong Jiang, A.E. Pyzh, V.A. Yarmolenko, M.A. Yarmolenko, A.S. Rudenkov // *Vacuum*. – 2023. – Vol. 209. – P. 111803.
14. *Revealing the adsorption mechanism of copper on hemp-based materials through EDX, nano-CT, XPS, FTIR, Raman, and XANES characterization techniques* / C. Mongioví, G. Crini, X. Gabrion, V. Placet, V. Blondeau-Patissier, A. Krystianiak, S. Durand, J. Beaugrand, A. Dorlando, C. Rivard, L. Gautier, A. Rita Lado Ribeiro, D. Lacalmita, B. Martel, J.-N. Staelens, A. Ivanovska, M. Kostic, O. Heintz, C. Bradu, M. Raschetti, N. Morin-Crini // *Chemical Engineering Journal Advances*. – 2022. – Vol. 10. – P. 100282.
15. *Synthesis and Study of the Physicochemical Properties of a Mesoporous Carbon Sorbent Modified with Amino Acids* / A.V. Sedanova, L.G. Pyanova, M.S. Delyagina, N.V. Kornienko, D.N. Ogurtsova, S.N. Nesov, V.A. Drozdov, N.N. Leonteva, A.V. Lavrenov // *Prot Met Phys Chem Surf*. – 2022. – Vol. 58. – P. 913–919. DOI: <https://doi.org/10.1134/S2070205122050227>.
16. A. Kolanowska, G. Dzido, M. Krzywiecki, M. M. Tomczyk, D. Lukowicz, S. Ruczka, Slawomir Boncel Carbon Quantum Dots from Amino Acids Revisited: Survey of Renewable Precursors toward High Quantum-Yield Blue and Green Fluorescence // *ACS Omega*. – 2022. – Vol. 7. – P. 41165–41176. – DOI: [10.1021/acsomega.2c04751](https://doi.org/10.1021/acsomega.2c04751).
17. M. Teske, H. Lange, K. Wulf, V. Senz, N. Grabow, T. Eickner, S. Oschatz Chemical characterization of plasma polymerized allylamine coatings with addition of ammonia and oxygen by XPS // *Current Directions in Biomedical Engineering*. – 2022. – Vol. 8. – P. 664–667. – DOI: <https://doi.org/10.1515/cdbme-2022-1169>.
18. *Interphase formation with carboxylic acids as slurry additives for Si electrodes in Li-ion batteries. Part 2: a photoelectron spectroscopy study* / F. Jeschull, H. Q. Pham, A. Ghamlouche, P. K. Thakur, S. Trabesinger, J. Maibach // *J. Phys. Energy*. – 2023. – Vol. 5. – P. 025002. – DOI: [10.1088/2515-7655/acbbe](https://doi.org/10.1088/2515-7655/acbbe).
19. *Bioactive textile coatings for improved viral protection: A study of polypropylene masks coated with copper salt and organic antimicrobial agents* / G.B. Calais, J.B.M.R. Neto, R.A. Bataglioli, P. Chevalier, J. Tsukamoto, C.W. Arns, D. Mantovani, M.M. Beppu // *Applied Surface Science*. – 2023. – Vol. 638. – P. 158112. – DIO: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.158112>.
20. *Surface and Structural Characterization of PVTMS Films Treated by Elemental Fluorine in Liquid Perfluorodecalin* / N.A. Belov, A.Y. Alentiev, D.S. Pashkevich, F.A. Voroshilov, E.S. Dvilis, I.P. Asanov, R.Y. Nikiforov, S.V. Chirkov, D.A. Syrtsova, J.V. Kostina, Y.G. Bogdanova // *Materials*. – 2023. – Vol. 16. – P. 913. – DOI: <https://doi.org/10.3390/ma16030913>.
21. Schaller, J. Studies on the Synthesis of 2,3-O-Hydroxyalkyl Ethers of Cellulose / J. Schaller, T. Heinze // *Macromol. Biosci*. – 2005. – Vol. 5. – P. 58–63. – DOI: [10.1002/mabi.200400136](https://doi.org/10.1002/mabi.200400136).
22. Heinze, T. New water-soluble cellulose esters synthesized by an effective acylation procedure / T. Heinze, J. Schaller // *Macromol. Chem. Phys*. – 2000. – Vol. 201. – P. 1214–1218. – DOI: [https://doi.org/10.1002/1521-3935\(20000801\)201:12<1214::AID-MACP1214>3.0.CO;2-9](https://doi.org/10.1002/1521-3935(20000801)201:12<1214::AID-MACP1214>3.0.CO;2-9).
23. *Thermal, Crystallization Properties, and Micellization Behavior of HEC-g-PPDO Copolymer: Microstructure Parameters Effect* / X.-T. Dong, W.-T. Shi, H.-C. Dang, W.-Y. Bao, X.-L. Wang, Y.-Z. Wang // *Ind. Eng. Chem. Res*. – 2012. – Vol. 51. – P. 14037–14046. – DOI: [dx.doi.org/10.1021/ie300873a](https://doi.org/10.1021/ie300873a).

Работа выполнена в рамках выполнения задания «Плазмохимическое осаждение и конструкция покрытий с пролонгированным освобождением лекарственных препаратов и их применение для лечения костных повреждений» по договору с БРФФИ №X22КИТГ-024 и проекта № 2022YFE0196800 Национального фонда естественных наук Китая Министерства науки и технологий КНР, а также в рамках НИИР «Разработка основ комбинированной технологии формирования планарно-структурированных углеродных покрытий из импульсной катодной углеродной плазмы и продуктов лазерного диспергирования полимерных материалов», комплексное задание 1.12 ГПНИ «Фотоника и электроника для инновации», подпрограмма «Фотоника и ее применения».

Поступила в редакцию 27.09.2023.

Информация об авторах

Ярмоленко Максим Анатольевич – д.т.н., доцент
Цзян Сю Хун – доктор наук, профессор
Рогачев Александр Александрович – чл.-корр. НАН Беларуси, д.т.н., профессор
Рогачёв Александр Владимирович – чл.-корр. НАН Беларуси, д.х.м., профессор
Руденков Александр Сергеевич – к.т.н., доцент
Фролов Сергей Анатольевич – стажер мл.н.с.
Михалко Алексей Михайлович – аспирант

СТЕПЕНИ ЭЛЕМЕНТОВ В *l*-АРНЫХ ГРУППАХ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА. III

А.М. Гальмак

Белорусский государственный университет пищевых и химических технологий, Могилёв

POWERS IN *l*-ARY GROUPS OF SPECIAL FORM. III

A.M. Gal'mak

Belarusian State University of Food and Chemical Technologies, Mogilev

Аннотация. В статье продолжается изучение степеней элементов в полиадических группах специального вида.

Ключевые слова: полиадическая операция, *n*-арная группа, степень элемента.

Для цитирования: Гальмак, А.М. Степени элементов в *l*-арных группах специального вида. III / А.М. Гальмак // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 60–63. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_60. – EDN: OYZHSI

Abstract. The study on the powers in polyadic groups of special form is carried on.

Keywords: polyadic operation, *n*-ary group, power.

For citation: Gal'mak, A.M. Powers in *l*-ary groups of special form. III / A.M. Gal'mak // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 60–63. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_60 (in Russian). – EDN: OYZHSI

Введение

Данная статья, посвящённая изучению степеней элементов в полиадических группах специального вида, является продолжением статей [1], [2] и составляет с ними единое целое. В связи с этим нумерация разделов в настоящей статье продолжает нумерацию разделов в [2]. Сохраняется преемственность в отношении соглашений, определений и обозначений из [1], [2], все они остаются в силе и в новой статье.

5 Случай циклической подстановки

В формулировке следующей теоремы, в отличие от теоремы 3.2, обратные последовательности явно не присутствуют.

Теорема 5.1. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – *n*-арная группа ($n \geq 3$), σ – подстановка из S_k порядка d , $l = td + 1$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент *l*-арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3}, \quad (5.1)$$

$$j = 1, \dots, k, r = 0, 1, \dots, d-1,$$

$$\beta_j = \alpha_{j(d-1)} a_{\sigma^{d-1}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{\beta_1 \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-tv-1}), \dots, \eta(\beta_k \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k \dots \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k)). \quad (5.2)$$

Доказательство. По теореме 3.2, если $v < 0$, то

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{\alpha_1^{-1} \overline{a_1} a_1 \dots a_1}_{n-3} \underbrace{\alpha_1^{-1} \dots \overline{a_1} a_1 \dots a_1}_{n-3} \alpha_1^{-1}), \dots, \eta(\underbrace{\alpha_k^{-1} \overline{a_k} a_k \dots a_k}_{n-3} \underbrace{\alpha_k^{-1} \dots \overline{a_k} a_k \dots a_k}_{n-3} \alpha_k^{-1})), \quad (5.3)$$

где последовательности α_j^{-1} определяются равенством (3.7). Заменив в этом равенстве каждую последовательность $\underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3}$ соответствующей левой частью α_{jr} равенства (5.1), видим, что

$$\alpha_j^{-1} = \alpha_{j(d-1)} a_{\sigma^{d-1}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)},$$

то есть

$$\alpha_j^{-1} = \beta_j. \quad (5.4)$$

Если в (5.1) $r = 0$, то, считая подстановку σ^0 тождественной, имеем

$$\alpha_{j0} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3}, j = 1, \dots, k. \quad (5.5)$$

Подставляя (5.4) и (5.5) в (5.3), получим (5.2). □

Если порядок подстановки σ делит $n-1$, то теорема 5.1 позволяет сформулировать ещё одну теорему.

Теорема 5.2. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – *n*-арная группа ($n \geq 3$), σ – подстановка из S_k порядка d , $n = pd + 1$ для некоторого натурального p , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент *l*-арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3},$$

$$j = 1, \dots, k, r = 0, 1, \dots, d-1, \\ \beta_j = \alpha_{j(d-1)} a_{\sigma^{d-1}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1} \dots \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1}), \dots, \\ \dots, \eta(\beta_k \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k} \dots \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k})).$$

Ввиду равенства $a^{[-1]} = \bar{a}$, из теорем 5.1 и 5.2 при $v = -1$ вытекают соответствующие результаты о косых элементах из [3, теоремы 2.1 и 2.2].

Так как цикл длины k из S_k имеет порядок k , то, полагая в теоремах 5.1 и 5.2 σ – цикл длины k из S_k , получим ещё две теоремы.

Теорема 5.3. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), σ – цикл длины k из S_k , $l = tk + 1$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$,

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3}, j = 1, \dots, k, r = 0, 1, \dots, k-1,$$

$$\beta_j = \alpha_{j(k-1)} a_{\sigma^{k-1}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1} \dots \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1}), \dots, \\ \dots, \eta(\beta_k \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k} \dots \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k})).$$

Теорема 5.4. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), σ – цикл длины k из S_k , $n = rk + 1$ для некоторого натурального p , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$,

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3}, j = 1, \dots, k, r = 0, 1, \dots, k-1,$$

$$\beta_j = \alpha_{j(k-1)} a_{\sigma^{k-1}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1} \dots \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1}), \dots, \\ \dots, \eta(\beta_k \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k} \dots \overline{a_k \alpha_{k0} \beta_k})).$$

Из теорем 5.3 и 5.4 при $v = -1$ вытекают соответствующие результаты о косых элементах из [3, теоремы 2.3 и 2.4].

Если в теореме 5.3 (в теореме 5.4) положить $k = n-1$, то $t = s$ ($p = 1$) и получим следующую теорему.

Теорема 5.5. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), σ – цикл длины $n-1$ из S_{n-1} , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_{n-1})$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^{n-1}, \eta_{s, \sigma, n-1} \rangle$,

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3},$$

$$j = 1, \dots, n-1, r = 0, 1, \dots, n-2,$$

$$\beta_j = \alpha_{j(n-2)} a_{\sigma^{n-2}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1} \dots \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1}), \dots, \\ \dots, \eta(\beta_{n-1} \overline{a_{n-1} \alpha_{(n-1)0} \beta_{n-1}} \dots \overline{a_{n-1} \alpha_{(n-1)0} \beta_{n-1}})).$$

Из теоремы 5.5 при $v = -1$ вытекает результат о косых элементах из [3, следствие 2.1].

Если в теореме 5.3 положить $k = l-1$, то $t = 1$. Поэтому из этой теоремы вытекает

Теорема 5.6. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), σ – цикл длины $l-1$ из S_{l-1} , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_{l-1})$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^{l-1}, \eta_{s, \sigma, l-1} \rangle$,

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3},$$

$$j = 1, \dots, l-1, r = 0, 1, \dots, l-2, \\ \beta_j = \alpha_{j(l-2)} a_{\sigma^{l-2}(j)} \dots \alpha_{j1} a_{\sigma(j)}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1} \dots \overline{a_1 \alpha_{10} \beta_1}), \dots, \\ \dots, \eta(\beta_{l-1} \overline{a_{l-1} \alpha_{(l-1)0} \beta_{l-1}} \dots \overline{a_{l-1} \alpha_{(l-1)0} \beta_{l-1}})).$$

Из теоремы 5.6 при $v = -1$ вытекает результат о косых элементах из [3, следствие 2.2].

Если в теореме 5.1 $\sigma = (ij)$ – транспозиция из S_k , то $d = 2$, $r = 0, 1$,

$$\beta_j = \alpha_{j1} a_{\sigma(j)} = \underbrace{a_{\sigma(j)} \dots a_{\sigma(j)}}_{n-3} \overline{a_i} = \underbrace{a_i \dots a_i}_{n-3} \overline{a_i} = \alpha_{i0} \overline{a_i},$$

$$\beta_i = \alpha_{i1} a_{\sigma(i)} = \underbrace{a_{\sigma(i)} \dots a_{\sigma(i)}}_{n-3} \overline{a_j} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3} \overline{a_j} = \alpha_{j0} \overline{a_j}.$$

Кроме того, так как $l-1 = s(n-1) = 2t$, то по предложению 3.1 для $m \neq i, m \neq j$ имеем

$$b_m = \eta(\underbrace{a_m \dots a_m}_{(n-3)(-2vt-1)} \underbrace{\overline{a_m} \dots \overline{a_m}}_{-2vt-1}).$$

Поэтому из теоремы 5.1 вытекает

Следствие 5.1. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), (ij) – транспозиция из S_k , $s(n-1) = 2t$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (ij), k} \rangle$. Тогда $\mathbf{a}^{[v]} = (b_1, \dots, b_k)$, где

$$b_j = \eta(\alpha_{i0} \overline{a_i} \underbrace{\overline{a_j} \alpha_{j0} \alpha_{i0} a_i \dots \overline{a_j} \alpha_{j0} \alpha_{i0} a_i}_{-nv-1}),$$

$$b_i = \eta(\alpha_{j0} \overline{a_j} \underbrace{\overline{a_i} \alpha_{i0} \alpha_{j0} a_j \dots \overline{a_i} \alpha_{i0} \alpha_{j0} a_j}_{-nv-1}),$$

$$b_m = \eta(\underbrace{a_m \dots a_m}_{(n-3)(-2vt-1)} \underbrace{\overline{a_m} \dots \overline{a_m}}_{-2vt-1}), m \neq i, m \neq j.$$

6 Цикл (12 ... d)

Конкретизируем полученные результаты для цикла $\sigma = (1 2 \dots d) \in S_k$.

Теорема 6.1. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $d \leq k$, $(1 \ 2 \ \dots \ d) \in \mathbf{S}_k$, $l = td + 1$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12 \dots d), k} \rangle$,

$$\alpha_{j0} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3}, \alpha_{j1} = \underbrace{a_{j+1} \dots a_{j+1}}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(d-j)} = \underbrace{a_d \dots a_d}_{n-3},$$

$$\alpha_{j(d-j+1)} = \underbrace{a_1 \dots a_1}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(d-1)} = \underbrace{a_{j-1} \dots a_{j-1}}_{n-3}, \quad (6.1)$$

$$\beta_j = \alpha_{j(d-1)} \overline{a_{j-1}} \dots \alpha_{j(d-j+1)} \overline{a_1} \alpha_{j(d-j)} \overline{a_d} \dots \alpha_{j1} \overline{a_{j+1}}. \quad (6.2)$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \underbrace{\overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-nv-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\beta_k \underbrace{\overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k \dots \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k}_{-nv-1})). \quad (6.3)$$

Доказательство. Так как порядок подстановки $(12 \dots d)$ равен d , то по теореме 5.1 справедливо равенство (6.3), где

$$\beta_j = \alpha_{j(d-1)} \overline{a_{\sigma^{d-1}(j)}} \dots \alpha_{j1} \overline{a_{\sigma(j)}}. \quad (6.4)$$

$$\alpha_{jr} = \underbrace{a_{\sigma^r(j)} \dots a_{\sigma^r(j)}}_{n-3}, j=1, \dots, k, r=0, 1, \dots, d-1. \quad (6.5)$$

А так как $\sigma = (12 \dots d)$, то

$$\sigma(j) = j + 1,$$

$$\sigma^2(j) = \sigma(\sigma(j)) = \sigma(j + 1) = j + 2,$$

$$\dots$$

$$\sigma^{d-j}(j) = \sigma(\sigma^{d-1-j}(j)) = \sigma(d-1) = d,$$

$$\sigma^{d+1-j}(j) = \sigma(\sigma^{d-j}(j)) = \sigma(d) = 1,$$

$$\dots$$

$$\sigma^{d-1}(j) = \sigma(\sigma^{d-2}(j)) = \sigma(j-2) = j-1,$$

$$\sigma^d(j) = \sigma(\sigma^{d-1}(j)) = \sigma(j-1) = j.$$

Поэтому последовательности $\alpha_{j0}, \alpha_{j1}, \dots, \alpha_{j(d-1)}$, определяемые равенствами (6.5), принимают вид (6.1), а правая часть равенства (6.4) совпадает с правой частью равенства (6.2) \square

Если порядок d цикла $(12 \dots d)$ делит $n-1$, то теорема 6.1 позволяет сформулировать ещё одну теорему.

Теорема 6.2. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $d \leq k$, $(12 \dots d) \in \mathbf{S}_k$, $n = pd + 1$ для некоторого натурального p , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12 \dots d), k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \underbrace{\overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-spv-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\beta_k \underbrace{\overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k \dots \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k}_{-spv-1})),$$

где последовательности β_j и $\alpha_{j0}, \alpha_{j1}, \dots, \alpha_{j(d-1)}$ определяются соответственно равенствами (6.1) и (6.2).

Из теорем 6.1 и 6.2 при $v = -1$ вытекают соответствующие результаты о косых элементах из [3, теоремы 2.5 и 2.6].

Следующие две теоремы получаются из теорем 6.1 и 6.2, если в них положить $d = k$.

Теорема 6.3. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $l = tk + 1$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12 \dots k), k} \rangle$,

$$\alpha_{j0} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3}, \alpha_{j1} = \underbrace{a_{j+1} \dots a_{j+1}}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(k-j)} = \underbrace{a_k \dots a_k}_{n-3},$$

$$\alpha_{j(k-j+1)} = \underbrace{a_1 \dots a_1}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(k-1)} = \underbrace{a_{j-1} \dots a_{j-1}}_{n-3}, \quad (6.6)$$

$$\beta_j = \alpha_{j(k-1)} \overline{a_{j-1}} \dots \alpha_{j(k-j+1)} \overline{a_1} \alpha_{j(k-j)} \overline{a_k} \dots \alpha_{j1} \overline{a_{j+1}}. \quad (6.7)$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \underbrace{\overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-nv-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\beta_k \underbrace{\overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k \dots \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k}_{-nv-1})).$$

Теорема 6.4. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $n = pk + 1$ для некоторого натурального p , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12 \dots k), k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \underbrace{\overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-spv-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\beta_k \underbrace{\overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k \dots \overline{a_k} \alpha_{k0} \beta_k}_{-spv-1})),$$

где последовательности β_j и $\alpha_{j0}, \alpha_{j1}, \dots, \alpha_{j(k-1)}$ определяются соответственно равенствами (6.6) и (6.7).

Из теорем 6.3 и 6.4 при $v = -1$ вытекают соответствующие результаты о косых элементах из [3, теоремы 2.7 и 2.8].

Следующая теорема получается из теоремы 6.3, если в ней положить $k = n-1$.

Теорема 6.5. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_{n-1})$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^{n-1}, \eta_{s, (12 \dots n-1), n-1} \rangle$,

$$\alpha_{j0} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3}, \alpha_{j1} = \underbrace{a_{j+1} \dots a_{j+1}}_{n-3}, \dots,$$

$$\dots, \alpha_{j(n-1-j)} = \underbrace{a_{n-1} \dots a_{n-1}}_{n-3},$$

$$\alpha_{j(n-j)} = \underbrace{a_1 \dots a_1}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(n-2)} = \underbrace{a_{j-1} \dots a_{j-1}}_{n-3},$$

$$\beta_j = \alpha_{j(n-2)} \overline{a_{j-1}} \dots \alpha_{j(n-j)} \overline{a_1} \alpha_{j(n-1-j)} \overline{a_{n-1}} \dots \alpha_{j1} \overline{a_{j+1}}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\beta_1 \underbrace{\overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1 \dots \overline{a_1} \alpha_{10} \beta_1}_{-sv-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\beta_{n-1} \underbrace{\overline{a_{n-1}} \alpha_{(n-1)0} \beta_{n-1} \dots \overline{a_{n-1}} \alpha_{(n-1)0} \beta_{n-1}}_{-sv-1})).$$

Из теоремы 6.5 при $v = -1$ вытекает результат о косых элементах из [3, теорема 2.9].

Следующая теорема вытекает из теоремы 6.3, если в ней положить $k = l-1$. Она же может быть доказана аналогично теореме 6.1, если воспользоваться теоремой 5.6.

Теорема 6.6. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – n -арная группа ($n \geq 3$), $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_{l-1})$ – произвольный элемент l -арной группы $\langle A^{l-1}, \eta_{s, (12 \dots l-1), l-1} \rangle$,

$$\alpha_{j0} = \underbrace{a_j \dots a_j}_{n-3}, \alpha_{j1} = \underbrace{a_{j+1} \dots a_{j+1}}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(l-j)} = \underbrace{a_{l-1} \dots a_{l-1}}_{n-3},$$

$$\alpha_{j(l-j)} = \underbrace{a_1 \dots a_1}_{n-3}, \dots, \alpha_{j(l-2)} = \underbrace{a_{j-1} \dots a_{j-1}}_{n-3},$$

$$\beta_j = \alpha_{j(l-2)} \underbrace{a_{j-1} \dots a_{j-1}}_{n-3} \alpha_{j(l-j)} \underbrace{a_1 \dots a_1}_{n-3} \alpha_{j(l-1-j)} \underbrace{a_{l-1} \dots a_{l-1}}_{n-3} \alpha_{j1} \underbrace{a_{j+1} \dots a_{j+1}}_{n-3}.$$

Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{\beta_1 \overline{a_1} \overline{\alpha_{10}} \overline{\beta_1} \dots \overline{a_1} \overline{\alpha_{10}} \overline{\beta_1}}_{-v-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\underbrace{\beta_k \overline{a_{l-1}} \overline{\alpha_{(l-1)0}} \overline{\beta_{l-1}} \dots \overline{a_{l-1}} \overline{\alpha_{(l-1)0}} \overline{\beta_{l-1}}}_{-v-1})).$$

Из теоремы 6.6 при $v = -1$ вытекает результат косых элементах из [3, теорема 2.10].

Тернарный случай. Следующее следствие вытекает из теоремы 5.1, если в ней положить $n = 3$.

Следствие 6.1. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, σ – подстановка из \mathbf{S}_k порядка d , $2s = td$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{a_{\sigma^{d-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)}}_{-vt-1} \dots \underbrace{a_{\sigma(1)}}_{-vt-1}),$$

$$\underbrace{a_1 a_{\sigma^{d-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)} \dots a_1 a_{\sigma^{d-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)}}_{-vt-1},$$

$$\dots,$$

$$\eta(\underbrace{a_{\sigma^{d-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)}}_{-vt-1} \dots \underbrace{a_{\sigma(k)}}_{-vt-1}),$$

$$\underbrace{a_k a_{\sigma^{d-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)} \dots a_k a_{\sigma^{d-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)}}_{-vt-1})).$$

Следующее следствие вытекает из следствия 6.1, если в нём положить, $d = 2$.

Следствие 6.2. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, σ – подстановка из \mathbf{S}_k порядка 2, $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{a_{\sigma(1)} \dots a_1 a_{\sigma(1)}}_{-vs-1}), \dots,$$

$$\dots, \eta(\underbrace{a_{\sigma(k)} \dots a_k a_{\sigma(k)}}_{-vs-1})).$$

Следующее следствие вытекает из следствия 6.1, если в нём положить σ – цикл длины k .

Следствие 6.3. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, σ – цикл длины k из \mathbf{S}_k , $2s = tk$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, \sigma, k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{a_{\sigma^{k-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)}}_{-vt-1} \dots \underbrace{a_{\sigma(1)}}_{-vt-1}),$$

$$\underbrace{a_1 a_{\sigma^{k-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)} \dots a_1 a_{\sigma^{k-1}(1)} \dots a_{\sigma(1)}}_{-vt-1},$$

$$\dots,$$

$$\eta(\underbrace{a_{\sigma^{k-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)}}_{-vt-1} \dots \underbrace{a_{\sigma(k)}}_{-vt-1}),$$

$$\underbrace{a_k a_{\sigma^{k-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)} \dots a_k a_{\sigma^{k-1}(k)} \dots a_{\sigma(k)}}_{-vt-1})).$$

Следующее следствие можно извлечь из следствия 6.2, если в нём положить, σ – транспозиция из \mathbf{S}_k . Оно же вытекает из следствия 5.1.

Следствие 6.4. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, $k \geq 3$, $\sigma = (ij)$ – транспозиция из \mathbf{S}_k , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (ij), k} \rangle$. Тогда $\mathbf{a}^{[v]} = (b_1, \dots, b_k)$, где

$$b_j = \eta(\underbrace{a_i \dots a_j a_i \dots a_j a_i}_{-vs-1}), b_i = \eta(\underbrace{a_j \dots a_i a_j \dots a_i a_j}_{-vs-1}),$$

$$b_m = \eta(\underbrace{a_m \dots a_m}_{-2vs-1}), m \neq i, m \neq j.$$

Следующее следствие вытекает из теоремы 6.1, если в ней положить $n = 3$.

Следствие 6.5. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, $d \leq k$, $(1\ 2 \dots d) \in \mathbf{S}_k$, $2s = td$ для некоторого натурального t , $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12 \dots d), k} \rangle$. Тогда

$$\mathbf{a}^{[v]} = (\eta(\underbrace{\beta_1 \overline{a_1} \overline{\beta_1} \dots \overline{a_1} \overline{\beta_1}}_{-tv-1}), \dots, \eta(\underbrace{\beta_k \overline{a_k} \overline{\beta_k} \dots \overline{a_k} \overline{\beta_k}}_{-tv-1})),$$

где

$$\beta_j = \overline{a_{j-1}} \dots \overline{a_1} \overline{a_d} \dots \overline{a_{j+1}}.$$

Следующее следствие можно извлечь из следствия 6.5, если в нём положить, σ – транспозиция $(1\ 2)$ из \mathbf{S}_k . Оно же вытекает из следствия 6.4.

Следствие 6.6. Пусть $\langle A, \eta \rangle$ – тернарная группа, $(1\ 2) \in \mathbf{S}_k$, $v < 0$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_k)$ – произвольный элемент $(2s + 1)$ -арной группы $\langle A^k, \eta_{s, (12), k} \rangle$. Тогда $\mathbf{a}^{[v]} = (b_1, \dots, b_k)$, где

$$b_1 = (\eta(\underbrace{a_2 \dots a_1 a_2 \dots a_1 a_2}_{vs-1}), b_2 = \eta(\underbrace{a_1 \dots a_2 a_1 \dots a_2 a_1}_{vs-1})),$$

$$b_m = \eta(\underbrace{a_m \dots a_m}_{-2vs-1}), m \neq 1, m \neq 2.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Гальмак, А.М. Степени элементов в l -арных группах специального вида. I / А.М. Гальмак // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 2 (55). – С. 47–51.
2. Гальмак, А.М. Степени элементов в l -арных группах специального вида. II / А.М. Гальмак // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 3 (56). – С. 38–43.
3. Гальмак, А.М. О косых элементах в полиадических группах специального вида, определяемых циклической подстановкой / А.М. Гальмак // Проблемы физики, математики и техники. – 2020. – № 3 (44). – С. 55–60.

Поступила в редакцию 09.09.2023.

Информация об авторах

Гальмак Александр Михайлович – д.ф.-м.н., профессор

σ -ПРОБЛЕМА КЕГЕЛЯ – ВИЛАНДТА ДЛЯ РАЗБИЕНИЯ $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$ **С.Ф. Каморников¹, В.Н. Тютянов²**¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины²Международный университет «МИТСО», Гомель**THE KEGEL – WIELANDT σ -PROBLEM FOR THE PARTITION $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$** **S.F. Kamornikov¹, V.N. Tyutyaynov²**¹Francisk Skorina Gomel State University²Gomel Branch of International University «MITSO», Gomel

Аннотация. В работе решается σ -проблема Кегеля – Виландта для разбиения $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$ множества всех простых чисел.

Ключевые слова: конечная группа, холлова подгруппа, σ -субнормальная подгруппа, σ -проблема Кегеля – Виландта.

Для цитирования: Каморников, С.Ф. σ -Проблема Кегеля – Виландта для разбиения $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$ / С.Ф. Каморников, В.Н. Тютянов // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 64–68. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_64. – EDN: QTOYZY

Abstract. For the partition $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$ of the set of all primes, the Kegel – Wielandt σ -problem is solved.

Keywords: finite group, Hall subgroup, σ -subnormal subgroup, Kegel – Wielandt σ -problem.

For citation: Kamornikov, S.F. The Kegel – Wielandt σ -problem for the partition $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$ / S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyaynov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 64–68. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_64 (in Russian). – EDN: QTOYZY

Введение

Все рассматриваемые в работе группы являются конечными.

Кегель в 1962 году в работе [1] предложил следующую концепцию p -субнормальной подгруппы: для данного простого числа p подгруппа H группы G называется p -субнормальной в G (при этом пишут $H \leq_p G$), если $H \cap P \in Syl_p(H)$ для любой силовской p -подгруппы P группы G . В этой же работе он выдвинул следующую гипотезу: подгруппа H конечной группы G является субнормальной в G тогда и только тогда, когда она p -субнормальна для любого простого числа p .

Виландт в 1980 году (см. [2]), когда классификация конечных простых групп была практически завершена, включил эту гипотезу в список наиболее важных проблем, требующих решения после завершения классификации. Поэтому с тех пор эту гипотезу называют проблемой Кегеля – Виландта.

Полное решение гипотезы Кегеля – Виландта, опирающееся на классификацию конечных простых групп, было получено Кляйдманом в 1991 году [3].

Пусть $\sigma = \{\sigma_i \mid i \in I\}$ – некоторое разбиение множества \mathbb{P} всех простых чисел, т. е. $\mathbb{P} = \cup_{i \in I} \sigma_i$ и $\sigma_i \cap \sigma_j = \emptyset$ для всех $i \neq j$. Пусть

G – σ -полная группа, т. е. G обладает по крайней мере одной холловой σ_i -подгруппой для любого $i \in I$. Для $i \in I$ мы пишем $H \leq_{\sigma_i} G$, если H – такая подгруппа группы G , что $H \cap S_i \in Hall_{\sigma_i}(H)$ для любой холловой σ_i -подгруппы S_i группы G .

В [4] (см. вопрос 19.86) А.Н. Скиба сформулировал следующий аналог гипотезы Кегеля – Виландта для σ -субнормальных подгрупп.

σ -Проблема Кегеля – Виландта: Верно ли, что подгруппа H σ -полной группы G является σ -субнормальной в G , если $H \leq_{\sigma_i} G$ для любого $i \in I$.

Концепция σ -субнормальности, развивающая идею субнормальной подгруппы, предложена А.Н. Скибой в [5]. Эта концепция базируется на следующем определении.

Для заданного разбиения σ множества всех простых чисел подгруппа H группы G называется σ -субнормальной в G , если существует цепь подгрупп $H = H_0 \subseteq H_1 \subseteq \dots \subseteq H_n = G$ такая, что для каждого $i = 1, 2, \dots, n$ либо подгруппа H_{i-1} нормальна в H_i , либо группа $H_i / Core_{H_i}(H_{i-1})$ является σ_j -группой для некоторого $j \in I$.

Понятно, что подгруппа H субнормальна в G тогда и только тогда, когда она σ -субнормальна в G для минимального разбиения $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{5\}, \dots\}$. Поэтому для минимального разбиения σ -проблема Кегеля – Виландта превращается в проблему Кегеля – Виландта.

В настоящее время σ -проблема Кегеля – Виландта решена для минимального разбиения (см. [3]), а также для произвольного бинарного разбиения (см. [6]; разбиение σ называется *бинарным*, если $\sigma = \{\pi, \pi'\}$ для некоторого множества π простых чисел). Кроме того, из работы [7] следует, что σ -проблема Кегеля – Виландта имеет положительное решение для разбиения $\sigma = \{\{2,3\}, \{5\}, \{7\}, \dots\}$.

В данной работе σ -проблема Кегеля – Виландта решается для разбиения $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$. Наша главная цель – доказательство следующей теоремы.

Теорема А. Пусть $\sigma = \{\{2\}, \{3\}, \{2,3\}'\}$. Подгруппа H группы $G \in E_{\{2,3\}'}$ является σ -субнормальной в G тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия: (1) $H \leq_2 G$; (2) $H \leq_3 G$; (3) $H \leq_{\{2,3\}'} G$.

Доказательство теоремы А опирается на следующую теорему В, имеющую самостоятельное значение.

Теорема В. Пусть G – простая неабелева группа и M – ее холлова подгруппа. Если $|G:M| = 2^\alpha \cdot 3^\beta$, где $\alpha \geq 2$, $\beta \geq 1$, то имеет место одно из следующих утверждений:

- (1) $G \cong A_5 \cong SL_2(4) \cong PSL_2(5)$, $M \cong Z_5$;
- (2) $G \cong A_6 \cong PSL_2(9)$, $M \cong Z_5$;
- (3) $G \cong PSL_2(7) \cong SL_3(2)$, $M \cong Z_7$;
- (4) $G \cong SL_2(8)$, $M \cong Z_7$;
- (5) $G \cong PSL_2(17)$, $M \cong Z_{17}$;
- (6) $G \cong SL_3(3)$, $M \cong Z_{13}$;
- (7) $G \cong SU_3(3)$, $M \cong Z_7$;
- (8) $G \cong PSU_4(2) \cong PSp_4(3)$, $M \cong Z_5$;
- (9) $G \cong M_{11}$, $M \cong Z_{11} : Z_5$;
- (10) $G \cong M_{12}$, $M \cong Z_{11} : Z_5$;
- (11) $G \cong PSL_2(q)$, $q = p^n$, $p \geq 5$, M содержится в подгруппе Бореля группы $PSL_2(q)$.

Ключом к доказательству теоремы В является теорема 1.1 из [8], описывающая простые группы, которые содержат подгруппу, индекс которой имеет в точности два различных простые делителя.

1 Определения и предварительные результаты

В работе используются определения и обозначения, принятые в [9]. Что касается терминологии

теории σ -субнормальных подгрупп, то мы отсылаем читателя к работе [5].

Будем использовать следующие обозначения:

- если p – простое число, то G_p – силовская p -подгруппа группы G и $Syl_p(G)$ – множество всех силовских p -подгрупп группы G ;
- если π – некоторое множество простых чисел, то $Hall_\pi(G)$ – множество всех холловых π -подгрупп группы G ;
- E_π – множество всех групп, обладающих холловыми π -подгруппами;
- если $\sigma = \{\sigma_i \mid i \in I\}$ – разбиение множества \mathbb{P} всех простых чисел и n – натуральное число, то $\sigma(n) = \{\sigma_i \cap \pi(n) \mid i \in I, \sigma_i \cap \pi(n) \neq \emptyset\}$;
- $\sigma(G) = \sigma(|G|)$;
- Z_n – циклическая группа порядка n ;
- если A и B – подгруппы группы G , то $A : B$ – их полупрямое произведение.

Мы будем использовать следующий результат.

Лемма 1.1 [10, теорема 3.1]. Пусть G – группа Шевалле нормального или скрученного типа, определенная над полем характеристики p . Пусть A – собственная холлова π -подгруппа группы G , причем π содержит p , но не содержит 3. Тогда либо $p = 2$, либо $2 \notin \pi$ и A содержится в подгруппе Бореля группы G .

Нам понадобятся также следующие теоретико-числовые результаты из [11].

Лемма 1.2. Пусть p и q – простые числа такие, что $p^m = q^n + 1$ для некоторых натуральных m и n . Тогда имеет место одно из следующих утверждений:

- (1) $q = 2$, $p = 3$, $n = 3$ и $m = 2$;
- (2) $q = 2$, $m = 1$, n – степень числа 2 и $p = q^n + 1$ – простое число Ферма;
- (3) $p = 2$, $n = 1$ и $q = p^m - 1$ – простое число Мерсенна, в частности, m – простое число.

Для натуральных чисел n и b простое число d , делящее $b^n - 1$, называется *примитивным простым делителем* числа $b^n - 1$ (или, иначе, примитивным по отношению к паре $\{n, b\}$), если d делит $b^n - 1$, но d не делит $b^i - 1$ для всех $1 \leq i < n$.

Лемма 1.3. Для натуральных чисел n и b справедливы следующие утверждения:

- (1) Существует примитивный простой делитель числа $b^n - 1$, кроме случаев $(b, n) = (2, 6)$ или b – простое число Мерсенна и $n = 2$.
- (2) Каждый примитивный простой делитель p числа $b^n - 1$ не меньше $n + 1$. Кроме того, если $p = n + 1$, то p^2 делит $b^n - 1$, за исключением следующих случаев:

- (i) $n = 2$ и $b \in \{2^s - 1, 3 \cdot 2^s - 1\}$;

- (ii) $b = 2$ и $n \in \{4, 6, 10, 12, 18\}$;
- (iii) $b = 3$ и $n \in \{4, 6\}$;
- (iv) $b = 5$ и $n = 6$.

(3) Если для натурального числа s примитивный делитель числа $b^s - 1$ делит $b^n - 1$, то s делит n .

Для классических простых групп лиева типа мы будем использовать далее обозначения книги [12].

Будем говорить, что σ -полная группа G является контрпримером к теореме А, если она обладает подгруппой H такой, что для некоторого полного холлова множества Σ типа σ и любого элемента $g \in G$ система Σ^g редуцируется в подгруппу H , но H не является σ -субнормальной в G . Если, кроме того, сумма $|G| + |H|$ минимальна, то пару (G, H) будем называть минимальным контрпримером к теореме А.

Для разбиения $\sigma = \{\sigma_i \mid i \in I\}$ система $\Sigma = \{S_1, S_2, \dots, S_k\}$ холловых σ_i -подгрупп ($i = 1, 2, \dots, k$) группы G называется полным холловым множеством типа σ группы G , если выполняются следующие два условия:

- 1) $(|S_i|, |S_j|) = 1$ для всех $i \neq j \in \{1, 2, \dots, k\}$;
- 2) $\pi(G) = \pi(S_1) \cup \pi(S_2) \cup \dots \cup \pi(S_k)$.

Если $\Sigma = \{S_1, S_2, \dots, S_k\}$ – полное холлово множество типа σ группы G , то, очевидно, система $\Sigma^g = \{S_1^g, S_2^g, \dots, S_k^g\}$ также является полным холловым множеством типа σ группы G для любого элемента $g \in G$.

Следующая лемма устанавливает строение минимального контрпримера к теореме А и сводит ее доказательство к анализу строения холловых подгрупп простых неабелевых групп.

Лемма 1.4 [13, лемма 2.4]. Пусть $\sigma = \{\sigma_i \mid i \in I\}$ – разбиение множества всех простых чисел. Если (G, H) – минимальный контрпример к теореме А, то G и H – простые неабелевы группы.

Лемма 1.5. Пусть G – простая неабелева группа и H – такая ее подгруппа, что $|H|$ делится на p и $H \leq_p G$ для некоторого простого числа $p \geq 5$. Тогда справедливо одно из следующих утверждений:

- 1) $H = G$;
- 2) $G \cong A_n$, $H \cong A_{n-1}$, где $n = s \cdot p^a > p$ и $1 \leq s < p$;
- 3) $G \cong U_3(5)$, $H \cong A_7$ и $p = 5$;
- 4) $G \cong HS$ – группа Хигмэна – Симса, $H \cong M_{22}$ и $p = 5$.

Доказательство леммы вытекает из теоремы 1.4 работы [7].

Лемма 1.6. Пусть H – подгруппа группы G и $S \in \text{Hall}_\pi(G)$ для некоторого множества π

простых чисел. Если $S_p \triangleleft S$ для некоторого $p \in \pi$ и $S^g \cap H \in \text{Hall}_\pi(H)$ для любого $g \in G$, то $H \leq_p G$.

Доказательство. Пусть $P \in \text{Syl}_p(G)$. По теореме Силова справедливо равенство $P = S_p^x$ для некоторого $x \in G$. Из условия леммы следует, что $S^x \cap H$ – холлова π -подгруппа из H . Пусть $P_1 \in \text{Syl}_p(S^x \cap H)$. Очевидно, P_1 – силовская p -подгруппа из H . Отсюда и из того, что $P = S_p^x$ – единственная силовская p -подгруппа в S^x , по теореме Силова имеем равенство $P \cap H = P_1$, т. е. $P \cap H$ – силовская p -подгруппа в H . Таким образом, $H \leq_p G$. \square

2 Доказательство теоремы В

Отметим, что если $|\pi(G)| = 3$, то в группе G любая силовская r -подгруппа M , где $r \in \pi(G) \setminus \{2, 3\}$, удовлетворяет условию теоремы. Список данных групп приведен, например, в [14, с. 20]:

$$G \in \{A_5 \cong SL_2(4) \cong PSL_2(5) (M \cong Z_5);$$

$$A_6 \cong PSL_2(9) (M \cong Z_5);$$

$$PSL_2(7) \cong SL_3(2) (M \cong Z_7); SL_2(8) (M \cong Z_7);$$

$$PSL_2(17) (M \cong Z_{17});$$

$$SL_3(3) (M \cong Z_{13}); SU_3(3) (M \cong Z_7);$$

$$PSU_4(2) \cong PSp_4(3) (M \cong Z_5)\}.$$

Поэтому далее будем считать, что $|\pi(G)| \geq 4$ и $|\pi(M)| \geq 2$.

Рассмотрим возможные случаи.

1) G – *спорадическая группа*. Тогда из [15, таблица 3] следует, что $G \cong M_{11}$ и $M \cong Z_{11} : Z_5$ или $G \cong M_{12}$ и $M \cong Z_{11} : Z_5$.

2) $G \cong A_n$, $n \geq 7$. Тогда из [15, таблица 2] следует, что группа G не содержит холловых подгрупп M таких, что $|G : M| = 2^\alpha \cdot 3^\beta$, где $\alpha \geq 2$, $\beta \geq 1$.

3) G – *группа лиева типа над полем характеристики p* . Сведения о существовании холловых подгрупп индекса $2^\alpha \cdot 3^\beta$ извлекаются, в основном, из работы [8].

(3.1) $G \cong PSL_n(p^f)$ для некоторого простого числа p .

Отметим, что подгруппа M является разрешимой. Поэтому из [8, таблица 4.1] следует, что или $G \cong SL_3(3)$, или $G \cong SL_3(2) \cong PSL_2(7)$, или $n = 2$. Однако в первых двух случаях $|\pi(G)| = 3$, поэтому $n = 2$. Пусть сначала $p \in \pi(M)$. Ясно, что $p \geq 5$. Тогда M содержится в подгруппе Бореля B (см. лемму 1.1) и $|G : B| = q + 1$. Следовательно, $|G : M|$ делится на $q + 1$. Отметим, что список таких простых групп не пуст и M может

как совпадать с подгруппой Бореля, так и быть ее собственной подгруппой. Например, для $G \cong PSL_2(11)$ подгруппа $M \cong Z_{11} : Z_5$ – подгруппа Бореля, а для $G \cong PSL_2(31)$ подгруппа M изоморфна группе $Z_{31} : Z_5$, в то время как $B \cong Z_{31} : Z_{15}$.

Пусть $p \notin \pi(M)$. В этом случае $p \in \{2, 3\}$. Пусть сначала $p = 2$. Из [8, таблица 4.1] следует, что возможны следующие случаи.

$$G \cong SL_2(2^{2^i}), M \cong Z_{2^{2^i-1}} \text{ и } |G : M| = 2^{2^i} (2^{2^i} + 1),$$

где $2^{2^i} + 1 = r$ – простое число Ферма. Ясно, что $2^{2^i} + 1 = 3$. Тогда $i = 0$ и $G \cong SL_2(2)$ – разрешимая группа, что невозможно.

$$G \cong PSL_2(2^{2^f}), M \cong Z_{2^{2^f+1}} \text{ и } |G : M| = 2^{2^f} (2^{2^f} - 1),$$

где $2^{2^f} - 1 = r$ – простое число Мерсенна. Очевидно, что $2^{2^f} - 1 = 3$ и $G \cong SL_2(4)$. Однако $|\pi(SL_2(4))| = 3$. Снова пришли к противоречию.

Рассмотрим также случай $M \cong Z_{2^{2^f-1}}$. Тогда $|G : M| = 2^{2^f} (2^{2^f} + 1)$. Если $2^{2^f} + 1 = r$ – простое число Ферма, то $2^{2^f} + 1 = 3$ и $G \cong SL_2(2)$, что невозможно. Однако по лемме 1.2 также выполняется равенство $2^{2^f} + 1 = 3^2$ и $G \cong SL_2(8)$. Отсюда $|\pi(SL_2(8))| = 3$, что противоречит предположению $|\pi(G)| \geq 4$.

Если $p = 3$, то $G \cong PSL_2(3^{2^i})$, $M \cong Z_{3^{2^i-1}}$ и $|G : M| = 3^{2^i} (3^{2^i} + 1)/2$. Так как $|M|$ – нечетное число, то этот случай невозможен.

Рассмотрим также следующий случай. Пусть M – тор порядка $(3^{2^i} - 1)/2$. Тогда $|G : M| = 3^{2^i} (3^{2^i} + 1)$ и, очевидно, $3^{2^i} + 1 = 2$. В этом случае $G \cong SL_2(3)$ – разрешимая группа, что невозможно. Пусть M – тор порядка $(3^{2^i} + 1)/2$. Тогда $|G : M| = 3^{2^i} (3^{2^i} - 1)$. По лемме 1.2 имеем, что $i = 1$ и $G \cong PSL_2(9)$. Однако $|\pi(SL_2(9))| = 3$.

(3.2) $G \cong PSp_{2m}(q)$, $2m \geq 4$, $q = p^f$, где p – простое число.

Список групп $PSp_{2m}(q)$, имеющих подгруппу индекса $2^\alpha \cdot 3^\beta$ можно извлечь из [8, таблица 4.2]. Случай $G \cong PSp_4(3)$ был рассмотрен. Разберем оставшиеся случаи.

$G \cong PSp_4(q)$ или $G \cong PSp_{2m}(2^f)$. Из [8, таблица 4.2] следует, что в обоих случаях подгруппа M не является холловой в G .

$G \cong PSp_4(p)$, $M \cong P_1$ – параболическая подгруппа индекса $(p+1)(p^2+1)$, где $p = 2^r - 1$ или $p = 2^{2^i} - 1$. В этом случае

$$|G| = \frac{1}{(2, p-1)} \cdot p^4 (p^2 - 1)(p^4 - 1).$$

По лемме 1.3 существует простое число t , примитивное по отношению к паре $\{p, 4\}$. Ясно, что t делит $p^2 + 1$. По лемме 1.3 число $t \geq 5$. Последнее невозможно. Случай, когда

$$M \cong Z_{p^4} : Z_{\frac{1}{a(2, p-1)(q-1)^2}}$$

и имеет индекс $a(p+1)^2(p^2+1)$, где $a \in \{1, 2\}$, рассматривается точно так же, как предыдущий.

(3.3) $G \cong PSU_n(q)$, $n \geq 3$, $q = p^f$, где p – простое число.

Список групп $PSU_n(q)$, имеющих подгруппу индекса $2^\alpha \cdot 3^\beta$ можно извлечь из [8, таблица 4.3]. Рассмотрим все случаи.

$G \cong PSU_3(p)$. В этом случае $|G : M|$ делится на $p^3 + 1$. Отметим, что группа $G \cong PSU_3(2)$ является разрешимой. Поэтому $p \geq 3$. По лемме 1.3 существует простое число r , примитивное по отношению к паре $\{p, 6\}$. Имеем

$$p^6 - 1 = (p^3 - 1)(p^3 + 1),$$

поэтому r делит $p^3 + 1$. Из леммы 1.3 заключаем, что $r \geq 7$. Последнее невозможно.

$G \cong PSU_4(p)$. Из [8, таблица 4.3] следует, что $|G : M|$ делится на $p^3 + 1$ и данный случай рассматривается как предыдущий.

$$G \cong PSU_n(q), M \cong SU_{n-1}(q),$$

$$|G : M| = q^{n-1} \cdot \frac{q^n + 1}{q + 1},$$

где n – нечетное простое число. В этом случае q делит $|M|$ и $|G : M|$, что невозможно.

(3.4) $G \cong \Omega_{2n+1}(q)$, $n \geq 3$, $q = p^f$, где p – нечетное простое число.

Из [8, таблица 4.4] следует, что во всех случаях $(|M|, |G : M|) \neq 1$. Последнее невозможно.

(3.5) $G \cong \Omega_{2m}^\pm(q)$, $m \geq 4$, $q = p^f$, где p – простое число.

Из [8, таблица 4.5] следует, что для групп $G \cong \Omega_{10}^+(2)$, $G \cong \Omega_8^-(2)$, $G \cong \Omega_{2(2^f+1)}^+(2)$,

$G \cong \Omega_{2^{i+1}}^-(2)$ подгруппа M имеет в G нечетный индекс, что невозможно. В оставшихся случаях $(|M|, |G : M|) \neq 1$, что также невозможно.

(3.6) G – исключительная группа лиева типа.

Из [8, таблица 5.1] следует, что группа G не имеет холловых подгрупп индекса $2^\alpha \cdot 3^\beta$. \square

2 Доказательство теоремы А

Если подгруппа H является σ -субнормальной в G , то ввиду [5, лемма 2.6] $H \leq_2 G$, $H \leq_3 G$, $H \leq_{\{2,3\}'} G$.

Докажем обратное утверждение теоремы. Пусть (G, H) – минимальный контрпример к теореме А. Тогда ввиду леммы 1.4 G и H – простые неабелевы группы. Так как группы из списка

$$\{A_5, PSL_2(7), SL_2(8), PSL_2(17), SL_3(3)\}$$

являются минимальными неразрешимыми группами, то ввиду теоремы В

$$G \in \{A_6, SU_3(3), PSU_4(2), M_{11}, M_{12}, PSL_2(q)\}.$$

Кроме того, для группы $PSL_2(q)$ выполняются условия: $q = p^n$, $p \geq 5$ и M содержится в подгруппе Бореля группы $PSL_2(q)$.

В силу [16] случай $G \in \{A_6, M_{11}, M_{12}\}$ невозможен.

Таким образом, $G \cong PSL_2(q)$, где $q = p^n$, $p \geq 5$ и M содержится в подгруппе Бореля группы $PSL_2(q)$.

Пусть $\sigma(G) = \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \sigma_3$, где $\sigma_1 = \{2\}$, $\sigma_2 = \{3\}$, $\sigma_3 = \{2, 3\}' \cap \pi(G)$.

Рассмотрим отдельно случаи $p = 5$ и $p \geq 7$.

1. Пусть $p = 5$. В этом случае $H \cong PSL_2(5^m)$, где m делит n . Кроме того, $5 \in \sigma_3$. Так как холлова σ_3 -подгруппа S группы G является 5-замкнутой, то по лемме 1.6 подгруппа H 5-субнормальна в G . Отсюда ввиду леммы 1.5 справедливо равенство $H = G$, что невозможно.

2. Пусть $p \geq 7$. В этом случае $H \cong PSL_2(p^m)$, где m делит n . Кроме того, подгруппа H может быть изоморфна A_5 . Если $H \cong PSL_2(p^m)$, то, как и в пункте 1.

Предположим, что $H \cong A_5$. Так как силовская 3-подгруппа P группы G является циклической, то по теореме 1 из [17] она является TI -подгруппой группы G . Число подгрупп, сопряженных с P в группе G , равно $q(q-1)$, а число силовских 3-подгрупп в A_5 равно 10. Так как $q(q-1) > 10$, то найдется силовская 3-подгруппа группы G , имеющая единичное пересечение с H . Пришли к противоречию с условием $H \leq_3 G$. \square

ЛИТЕРАТУРА

1. Kegel, O.H. Sylow-Gruppen und Subnormalteiler endlicher Gruppen / O.H. Kegel // Math. Z. – 1962. – Vol. 78. – P. 205–221.
2. Wielandt, H. Zusammengesetzte Gruppen: Hölders Programm heute / H. Wielandt // Proc. Pure Math. – 1980. – Vol. 37. – P. 161–173.
3. Kleidman, P.B. A proof of the Kegel – Wielandt conjecture on subnormal subgroups / P.B. Kleidman // Ann. Math. – 1991. – Vol. 133. – P. 369–428.
4. The Kourovka Notebook: Unsolved problems in group theory. – Novosibirsk: Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2022. – 269 p.

5. Skiba, A.N. On σ -subnormal and σ -permutability subgroups of finite groups / A.N. Skiba // J. Algebra. – 2015. – Vol. 436. – P. 1–16.

6. Ballester-Bolinches, A. On the Kegel – Wielandt σ -problem for binary partitions / A. Ballester-Bolinches, S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyaynov // Annali di Matematica Pura ed Applicata. – 2022. – Vol. 201. – P. 443–451.

7. Guralnick, R. Sylow p -subgroups and subnormal subgroups of finite groups / R. Guralnick, P.B. Kleidman, R. Lyons // Proc. London Math. Soc. – 1993. – Vol. 66, № 1. – P. 129–151.

8. Li, C.H. On permutation groups of degree a product of two prime-powers / C.Y. Li, X. Li // Communications in Algebra. – 2014. – Vol. 42. – P. 4722–4743.

9. Doerk, K. Finite soluble groups / K. Doerk, T. Hawkes. – Berlin – New York: Walter de Gruyter, 1992. – 891 p.

10. Gross, F. Hall subgroups of order not divisible by 3 / F. Gross // Rocky mountain journal of mathematics. – 1993. – Vol. 23, № 2. – P. 569–591.

11. Zsigmondy, K. Zur Theorie der Potenzreste / K. Zsigmondy // Monath. Math. Phys. – 1892. – Vol. 3. – P. 265–284.

12. Kleidman, P. The subgroup structure of the finite classical groups / P. Kleidman, M. Liebeck. – Cambridge: Cambridge University Press, 1990. – 303 p.

13. Kamornikov, S.F. On σ -subnormal subgroups of finite groups / S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyaynov // Siberian Mathematical Journal. – 2020. – Vol. 61, № 2. – P. 266–270.

14. Горенштейн, Д. Конечные простые группы. Введение в их классификацию / Д. Горенштейн. – Москва: Мир, 1985. – 352 с.

15. Вдовин, Е.П. Теоремы силовского типа / Е.П. Вдовин, Д.О. Ревин // УМН. – 2011. – Т. 66, № 5. – С. 3–46.

16. Kamornikov, S.F. On some aspects of the Kegel-Wielandt σ -problem / S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyaynov // Russian Mathematics. – 2022. – Vol. 66, № 2. – P. 15–24.

17. Blau, H.I. On trivial intersection of cyclic Sylow subgroups / H.I. Blau // Proc. Amer. Math. Soc. – 1985. – Vol. 94. – P. 572–576.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта Ф23РНФ-237.

Поступила в редакцию 15.08.2023.

Информация об авторах

Каморников Сергей Фёдорович – д.ф.-м.н., профессор
Тютянов Валентин Николаевич – д.ф.-м.н., профессор

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТРАВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ В ПЛАЗМЕ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

В.В. Емельянов¹, А.Н. Купо², В.А. Емельянов³

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск

²Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

³ОАО «Интеграл», Минск

PHENOMENOLOGICAL MODEL OF METAL COATING ETCHING IN A GAS MIXTURED PLASMA

V.V. Emelyanov¹, A.N. Kupo², V.A. Emelyanov³

¹Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk

²Francisk Skorina Gomel State University

³JSC "INTEGRAL", Minsk

Аннотация. Построена феноменологическая модель плазмохимического травления алюминиевого покрытия, являющегося основой токонесущих микроконструкций в технологиях изделий электронной техники, в газовой среде, содержащей парциальные компоненты BCl_3 $c_1 = (50\text{--}65 \text{ об.}\%)$, Cl_2 $c_2 = (25\text{--}35 \text{ об.}\%)$ и N_2 $c_3 = (0\text{--}30 \text{ об.}\%)$ при давлении $P = 150\text{--}250$ мТорр и плотности мощности плазмы $W = 1,6\text{--}2,2$ Вт/см².

Ключевые слова: плазмохимическое травление, алюминиевые межсоединения, математическое моделирование плазменных процессов.

Для цитирования: Емельянов, В.В. Феноменологическая модель травления металлического покрытия в плазме газовой смеси / В.В. Емельянов, А.Н. Купо, В.А. Емельянов // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 69–73. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_69. – EDN: RRMEEJ

Abstract. A phenomenological model of plasma-chemical etching of an aluminum coating is created, which is the basis of current-carrying microstructures in electronic product technologies, in a gas environment containing partial components BCl_3 $c_1 = (50\text{--}65 \text{ vol.}\%)$, Cl_2 $c_2 = (25\text{--}35 \text{ vol.}\%)$ and N_2 $c_3 = (0\text{--}30 \text{ vol.}\%)$, at a pressure $P = 150\text{--}250$ mTorr, and plasma power density $W = 1,6\text{--}2,2$ W/cm².

Keywords: plasma-chemical etching, aluminum interconnects, mathematical modeling of plasma processes.

For citation: Emelyanov, V.V. Phenomenological model of metal coating etching in a gas mixture plasma / V.V. Emelyanov, A.N. Kupo, V.A. Emelyanov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 69–73. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_69 (in Russian). – EDN: RRMEEJ

Введение

Уменьшение размеров активных элементов изделий микроэлектроники, и, как следствие, повышение степени интеграции приводит к тому, что существенная площадь изделия оказывается занятой электрическими межсоединениями. Увеличение общей длины межсоединений при неизбежном одновременном уменьшении их поперечного сечения приводит к значительному увеличению импеданса, в результате чего существенно снижается быстродействие приборов. Одним из возможных путей решения указанной проблемы являются многоуровневые межсоединения [1].

В свою очередь, многоуровневая система тоже обладает рядом недостатков, основным из которых является обрыв токоведущих дорожек вследствие нарушения «сплошности» диэлектрических покрытий, формируемых последующим

газофазным осаждением на ступеньках топологического рельефа. Наличие полостей в диэлектрике, заполняющем пространство между токоведущими дорожками, провоцирует развитие паразитных механических микронапряжений и сопутствующих дефектов: накопления неконтролируемых примесей, растрескивания и т. п., приводящих в конечном итоге к отказам приборов. [1], [2].

Ранее авторами в статье [2] предложен один из способов решения такой задачи. Предлагается целесообразным формировать поперечный профиль токоведущих алюминиевых дорожек в форме равнобедренной трапеции с внешними углами при нижнем основании, равными $\theta \approx 75\text{--}85^\circ$. Это приводит к устранению эффекта экранирования при последующем осаждении диэлектрика, предотвращению его преимущественного роста в верхней части канавок между

дорожками и, соответственно, однородному заполнению углублений топологического рельефа материалом диэлектрика и далее материалом последующего слоя. Выбор угла наклона боковых стенок токоведущих дорожек основан как на устранении эффекта экранирования, так и на минимизации полезной площади, занимаемой металлизацией. При углах наклона более 85° , вследствие некоторой неперпендикулярности потока осаждаемых частиц диэлектрика рабочей поверхности полупроводниковой пластины, наблюдается появление отдельных полостей в диэлектрике. С другой стороны, углы наклона менее 75° требуют уже заметного увеличения площади металлизации без снижения ее электрического сопротивления, что является нерациональным [2].

1 Постановка задачи моделирования

Травление пленки сплава на основе алюминия проводят в плазме газовой смеси BCl_3 $c_1 = (50\text{--}65 \text{ об.}\%)$, Cl_2 $c_2 = (25\text{--}35 \text{ об.}\%)$ и N_2 $c_3 = (0\text{--}30 \text{ об.}\%)$ при давлении $P = 150\text{--}250 \text{ мТорр}$ и плотности мощности плазмы $W = 1,6\text{--}2,2 \text{ Вт/см}^2$.

Микропрофиль зоны травления формируется по механизму анизотропного травления, стимулированного ионной бомбардировкой [3], характерному для случая, когда энергия ионов плазмы $\geq 100 \text{ эВ}$ [4]. При этом управлять степенью пространственной анизотропии травления, в конечном итоге определяющей угол наклона профиля θ , можно, изменяя такие параметры процесса, как давление в рабочей камере (концентрацию ионов), плотность мощности плазмы (энергию ионов), парциальный состав газовой смеси (массы и импульсы ионов). Показатель анизотропии определяется как отношение скоростей

травления в вертикальном и горизонтальном направлениях относительно поверхности материала [3]. Однако, для моделирования в качестве критерия анизотропии целесообразно использовать тангенс угла наклона стенки [5]:

$$\text{tg } \theta = \frac{v_v}{v_h}, \quad (1.1)$$

где v_v – вертикальная составляющая скорости травления; v_h – горизонтальная составляющая скорости травления.

При этом обе составляющие скорости травления в зависимости от параметров процесса имеют тенденцию изменяться, формируя как целевой профиль, так и дефекты процесса (рисунок 1.1): «перетрав» с эрозией маски, «подтрав» нижележащего подслоя, эффект отрицательного клина, trenching-эффект и пр. [6].

В исследуемом процессе проявляется ярко выраженная зависимость анизотропии травления от плотности мощности плазмы и давления в реакторе. При этом, если рост плотности мощности плазмы W однозначно приводит к росту средней кинетической энергии ионов, движущихся перпендикулярно поверхности, т. е. усиливает вертикальную составляющую скорости травления, то, с другой стороны, повышение давления приводит к уменьшению длины свободного пробега и закономерному увеличению вероятности попадания ионов на боковые стенки за счёт столкновений в плазменном потоке. Кроме того, на анизотропию травления влияет фазовый состав плазмы, т. к. ионы разной химической природы имеют различные массы, различный диаметр эффективного сечения взаимодействия, различные статистические распределения по скоростям и импульсам и т. п.

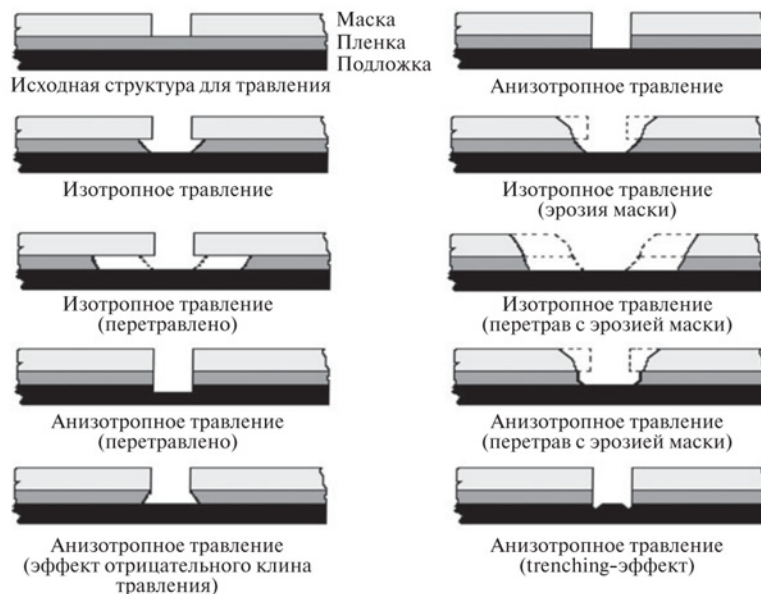


Рисунок 1.1 – Виды изотропного и анизотропного травления и дефекты процесса [6]

Учитывая выше сказанное, будем полагать, что в случае, когда длина свободного пробега молекул $\lambda \geq 0,2$ мкм (толщина слоя Al + 1%Si, подвергаемого травлению 0,8–1,4 мкм), то преобладает вертикальная составляющая скорости травления, и вероятность горизонтального травления минимальна. В случае, когда $\lambda \leq 0,2$ мкм, то за счёт межмолекулярных столкновений, наряду с вертикальной составляющей скорости травления, возникает горизонтальная, обеспечивающая при соответствующих режимах необходимый профиль травления.

При этом, в предположении, что молекулы компонент плазмы ведут себя как твёрдые сферы, среднюю длину свободного пробега $\langle \lambda \rangle$ которых можно рассчитать по формуле [7]:

$$\langle \lambda \rangle = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi d^2 P}, \quad (1.2)$$

где: $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура; P – давление плазмы в реакторе; d – эффективный диаметр молекулы.

Поскольку в смеси присутствуют молекулы BCl_3 $d_1 = 0,41$ нм; Cl_2 $d_2 = 0,37$ нм и N_2 $d_3 = 0,32$ нм [8], то можно полагать, что эффективный диаметр сферы столкновения составляет величину, определяемую по формуле:

$$d = c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_3 d_3. \quad (1.3)$$

Температура плазмы пропорциональна плотности мощности W , и для оценки можно использовать литературные данные [9], согласно которым в исследуемом диапазоне плотностей мощности значения температуры с достоверностью аппроксимации $R^2 = 0,98$ соответствуют эмпирической линейной зависимости:

$$T = 180,96 \cdot W + 89,97, \quad (1.4)$$

где T – термодинамическая температура (К); W – плотность мощности плазмы ($\text{Вт}/\text{см}^2$).

Далее, основываясь на молекулярно-кинетической модели Максвелла – Больцмана, для расчёта вероятности столкновений в плазменном потоке можно использовать известное выражение, характерное для распределения частиц по длинам свободного пробега в идеальном газе [7]

$$f(\lambda) = \frac{dn}{nd\lambda} = \frac{4}{\sqrt{\pi} \langle \lambda \rangle^3} \lambda^2 \exp\left(-\left(\frac{\lambda}{\langle \lambda \rangle}\right)^2\right). \quad (1.5)$$

При этом распределение активных частиц по длинам свободного пробега зависит от температуры, давления и объёмной концентрации (эффективный диаметр столкновения) в плазменной смеси (рисунки 1.2–1.4). Функция $f(\lambda)$ представляет собой плотность вероятности того, что относительная доля частиц обладает длиной свободного пробега в интервале $\lambda \pm d\lambda$, тогда вероятность столкновения определяется, как интеграл указанной функции в соответствующих пределах. А именно, доля вертикальной

составляющей скорости травления v_z будет соответствовать интегралу в пределах от 0,2 до 0,8 мкм, что соответствует границе слоя травления, а доля горизонтальной составляющей v_x от «0» до 0,2 мкм.

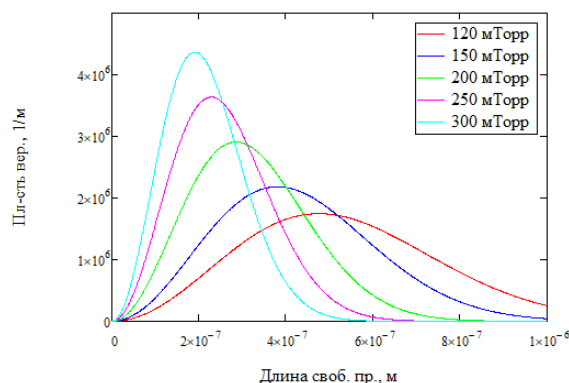


Рисунок 1.2 – Распределение частиц по длинам свободного пробега в случае $T = 300$ К, $d = 0,35$ нм при различных давлениях P газовой смеси

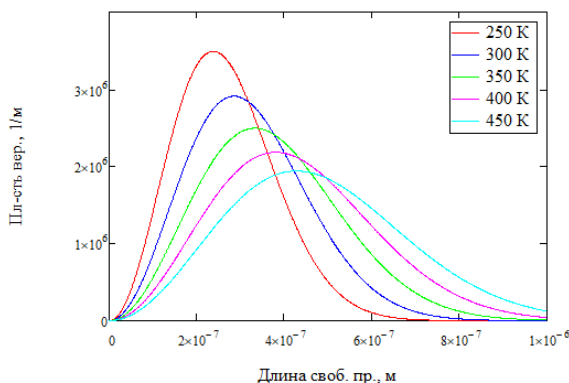


Рисунок 1.3 – Распределение частиц по длинам свободного пробега в случае $P = 200$ мТорр, $d = 0,35$ нм при различных температурах T

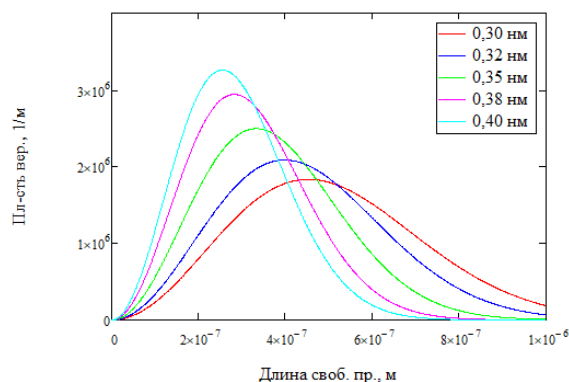


Рисунок 1.4 – Распределение частиц по длинам свободного пробега в случае $P = 200$ мТорр, $T = 350$ К при различных эффективных диаметрах сферы столкновения

Таким образом, варьируя существенные параметры процесса, такие как давление в рабочей камере, плотность мощности плазмы и её парциальный состав, можно оценить вероятность

наличия горизонтальной составляющей скорости травления v_r молекулярного потока.

2 Оценка влияния режимов травления и фазового состава плазмы на структуру покрытия Al + 1%Si

Посредством представленной феноменологической модели проведено исследование зависимостей скоростей травления v_6 и v_2 и, соответственно тангенса угла наклона боковых стенок токоведущих дорожек от давления в рабочей камере P , плотности мощности плазмы W , объёмных долей компонент плазмы (c_1, c_2, c_3).

Например, при $P = 200$ мТорр, $W = 2,0$ Вт/см² и BCl_3 $c_1 = 55$ об.%, Cl_2 $c_2 = 30$ об.% и N_2 $c_3 = 15$ об.%, расчёты проведённые по формулам (1.1)–(1.5) приводят к значению $\theta = 82,7^\circ$ при экспериментальном значении 80° . При этом, для $P = 300$ мТорр, $W = 2,0$ Вт/см² и BCl_3 $c_1 = 55$ об.%, Cl_2 $c_2 = 30$ об.% и N_2 $c_3 = 15$ об.%, расчётный угол наклона боковых стенок составляет $66,9^\circ$, а экспериментальное значение 70° [1]. В таблице 2.1 представлен сравнительный анализ зависимости угла наклона боковых стенок полученных токоведущих дорожек от давления в рабочей камере P при прочих неизменных параметрах.

Таблица 2.1 – Влияние давления P в рабочей камере на угол наклона боковых стенок токоведущих дорожек θ , при $W = 2,0$ Вт/см² и BCl_3 $c_1 = 55$ об.%, Cl_2 $c_2 = 30$ об.% и N_2 $c_3 = 15$ об.%

P , мТорр	θ экспериментальный, °	θ теоретический, °
120	88	87,7
150	85	86,5
200	80	82,7
250	75	76,3
300	70	66,9

Также исследована зависимость угла наклона θ токоведущих дорожек от плотности мощности W плазмы, при неизменном давлении P в рабочей камере реактора. Результаты представлены в таблице 2.2.

Таблица 2.2 – Влияние плотности мощности плазмы на угол наклона боковых стенок токоведущих дорожек θ , при $P = 200$ мТорр и BCl_3 $c_1 = 55$ об.%, Cl_2 $c_2 = 30$ об.% и N_2 $c_3 = 15$ об.%

W , Вт/см ²	θ экспериментальный, °	θ теоретический, °
1,2	73	68,1
1,6	80	78,0
2,0	80	82,7
2,2	80	84,1
2,5	87	85,5

Наиболее интересным, с точки зрения растворения материала металлизированного слоя, является влияние на наклон токоведущих дорожек процентное соотношение травителей BCl_3 и Cl_2 , так как именно они образуют с алюминием летучие соединения, составляющие сам процесс плазменного травления. Результаты такого исследования приведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3 – Влияние соотношения объёмных концентраций травителей BCl_3 и Cl_2 (c_1 / c_2) на угол наклона боковых стенок дорожек металлизации θ , при давлении $P = 200$ мТорр и плотности мощности плазмы $W = 2,0$ Вт/см²

c_1 / c_2 , отн.ед	θ экспериментальный, °	θ теоретический, °
55 / 30	80	82,7
45 / 30	85	85,9
50 / 30	85	85,7
65 / 30	80	80,6
70 / 30	70	84,7
55 / 20	65	85,8
55 / 25	80	85,6
55 / 35	80	85,3
55 / 40	90	85,2
45 / 25	70	86,1

Как видно, в отличие от результатов, представленных в таблицах 2.1 и 2.2, в таблице 2.3 для некоторых режимов наблюдаются существенные до 25 % расхождения (значения выделены полужирным начертанием). Такое несоответствие можно объяснить тем, что при превышении концентрации хлорида бора по отношению к молекулярному хлору в 1,8–2,3 раза, образуются новые летучие соединения (продукты реакции непосредственного физического травления), которые активно участвуют во вторичных столкновениях.

Заключение

Представленная феноменологическая модель позволяет оценить влияние параметров процесса плазмохимического травления, таких как давление в рабочей камере, плотность мощности плазмы, соотношение ингредиентов газовой смеси, на скорость и геометрию получаемых поверхностных микроструктур, в частности, «дорожек металлизации». Показано, что такая модель с доверительной вероятностью в процентном выражении не превышающей 7 %, отражает влияние на процесс плазмохимического травления его существенных параметров. Однако, при установлении зависимости анизотропии травления от соотношения концентраций активных компонентов плазмы, в ряде случаев обнаружены существенные расхождения, которые можно объяснить образованием в рабочей камере вторичных продуктов реакции.

ЛИТЕРАТУРА

1. Емельянов, В.В. Многослойные токопроводящие пленки на основе алюминия для полупроводниковых приборов и интегральных микросхем / В.В. Емельянов, В.А. Емельянов, В.В. Баранов // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Сер. Фіз.-тэхн. навук. – 2020. – Т. 65, № 2. – С. 170–176.
2. Емельянов, В.В. Многослойные системы металлизации субмикронных интегральных схем / В.В. Емельянов // Доклады БГУИР. – 2022. – Т. 20, № 7. – С. 36–42.
3. Технологические процессы осаждения и травления в технологии изготовления ИМС и МЭМС: учеб.-метод. пособие / Д.А. Котов [и др.]. – Минск: БГУИР, 2020. – 68 с.
4. Musil, J. Chen. A perspective of magnetron sputtering in surface engineering / J. Chen Musil // Surface and Coatings Technology. – 1999. – Vol. 112. – P. 162–169.
5. Сангвал, К. Травление кристаллов: теория, эксперимент, применение / К. Сангвал. – Москва: Мир, 1990. – 492 с.
6. Галперин, В.А. Процессы плазменного травления в микро- и нанотехнологиях: учебное

пособие / В.А. Галперин, Е.В. Данилкин, А.И. Молчанов; под ред. С.П. Тимошенко. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 283 с.

7. Шершнев, Е.Б. Основы молекулярно-кинетической теории: практическое пособие / Е.Б. Шершнев, А.Н. Купо, С.А. Лукашевич. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2022. – 31 с.

8. Способы определения размеров молекул [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://obuchonok.ru/node/5683> – Дата доступа: 15.09.2023.

9. Сухое травление алюминия в хлоре / С.А. Пивоваренко, А.В. Дунаев, А.М. Ефремов, В.И. Светцов // Химия и химическая технология. – 2008. – Т. 51, вып. 11. – С. 17–21.

Поступила в редакцию 20.09.2023.

Информация об авторах

Емельянов Виктор Викторович – аспирант
Купо Александр Николаевич – к.т.н., доцент
Емельянов Виктор Андреевич – д.т.н., профессор

МЕТОД МАРШРУТИЗАЦИИ В СЕТЯХ IIoT С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ДЛЯ ПРОТОКОЛА RPL

О.А. Лавшук¹, Н.И. Листопад²

¹Белорусская государственная академия связи, Минск

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск

ROUTING METHOD IN IIoT NETWORKS USING CLUSTERING FOR THE RPL PROTOCOL

O.A. Lavshuk¹, N.I. Listopad²

¹Belarusian State Academy of Telecommunications, Minsk

²Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk

Аннотация. Рассмотрен принцип работы протокола RPL для сетей с низким энергопотреблением и потерями. Выполнено моделирование и проводится оценка протокола RPL. Обоснована необходимость использования кластеризации для больших одноранговых сетей промышленного Интернета вещей. Предложен алгоритм выбора главных узлов в кластерах и разработаны два алгоритма расчета рангов при определении наилучших маршрутов от главных узлов в кластере к шлюзу.

Ключевые слова: интернет вещей, шлюз, сенсорный узел, надежность передачи, режимы энергопотребления, кластеризация.

Для цитирования: Лавшук, О.А. Метод маршрутизации в сетях IIoT с использованием кластеризации для протокола RPL / О.А. Лавшук, Н.И. Листопад // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 74–80. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_74. – EDN: RVSCGG

Abstract. The article describes the principle of operation of the RPL protocol for networks with low power consumption and losses. Modeling has been done and the RPL protocol is being evaluated. The necessity of using clustering for large peer-to-peer networks of the industrial Internet of things is substantiated. An algorithm for choosing the main nodes in clusters is proposed and two algorithms for calculating ranks are developed when determining the best routes from the main nodes in the cluster to the gateway.

Keywords: Internet of things, gateway, sensor node, transmission reliability, power consumption modes, clustering.

For citation: Lavshuk, O.A. Routing method in IIoT networks using clustering for the RPL protocol / O.A. Lavshuk, N.I. Listopad // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 74–80. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_74 (in Russian). – EDN: RVSCGG

Введение

Промышленный Интернет вещей (IIoT) зависит от данных, собираемых многими датчиками, контроллерами и серверами. IIoT улучшает производство, используя надежную и безопасную связь между промышленными объектами при поддержке новых вычислительных технологий.

В промышленных сетях количество подключенных устройств быстро увеличивается, что влечет проблемы связанные с маршрутизацией и безопасностью.

Беспроводная сенсорная сеть состоит из небольших устройств, соединенных по радиоканалу. Сенсорные устройства имеют ограниченные ресурсы, такие как энергия, память и вычислительная мощность. В этой области проводится множество исследований. Например, какие протоколы связи являются наиболее энергоэффективными и обеспечивают наибольший срок службы [1].

Сети, работающие по протоколу RPL, привязаны к корневому маршрутизатору, который обычно действует как пограничный в сетях 6LoWPAN, т. е. обеспечивает маломощную сенсорную сеть с подключением к внешним сетям Internet.

Как известно [1] RPL (Routing Protocol for Low energy and Lossy networks) – это протокол для сетей с низким потреблением энергии и потерями, в основе которого лежат направленные ациклические графы DODAG (Destination Oriented Directed Acyclic Graph). Протокол RPL образует древовидную топологию (рисунок 0.1), также называемую DAG (Directed Acyclic Graph). У каждого узла в сети RPL есть предпочтительный родитель, который действует как шлюз для этого узла. Если узел не имеет записи в своей таблице маршрутизации для пакета, узел просто пересылает его своему предпочтительному родителю и так далее, пока он не достигнет пункта

назначения или общего родителя, который пересылает его вниз по дереву к месту назначения. Это означает, что узлы, расположенные ближе к корневому узлу, имеют большие таблицы маршрутизации. [2]

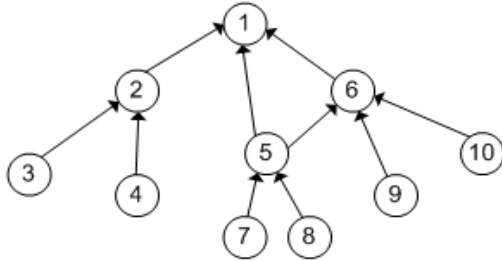


Рисунок 0.1 – Топология сети RPL

RPL использует три типа управляющих сообщений для создания и поддержки топологии RPL и таблицы маршрутизации. Этими сообщениями являются: информационный объект DODAG (DIO), запрос информации DODAG (DIS) и объект объявления пункта назначения DODAG (DAO). Сообщения DIO используются RPL для формирования, поддержки и обнаружения DODAG. Когда сеть RPL запускается, узлы начинают обмениваться информацией о DODAG с помощью сообщений DIO, которые содержат информацию о конфигурации DODAG и помогают узлам присоединиться к DODAG и выбрать родителей. DIS используется любым узлом для явного запроса сообщений DIO от соседних узлов. Он запускается узлом в случае, если он не может получить DIO через заданный интервал времени.

Протокол RPL поддерживает две целевые функции: MRHOF для нахождения оптимального пути использует метрику ETX. OFO для нахождения оптимального пути использует количество переходов. Целевая функция определяет, как узел RPL выбирает и оптимизирует маршруты в протоколе RPL на основе доступных информационных объектов.

ETX отражает потерю пакетов, учитывая качество беспроводного канала и коллизии пакетов. ETX зависит от расстояния между двумя узлами, так как вероятность успешной передачи уменьшается с увеличением расстояния. ETX можно уменьшить за счет увеличения мощности передач узлов, но это увеличит диапазон помех в беспроводной среде. ETX можно представить формулой (0.1):

$$ETX = \frac{1}{D_f \times D_r}, \quad (0.1)$$

где D_f – вероятность успешного получения пакетов соседним узлом; D_r – вероятность успешного получения подтверждения.

1 Моделирование в ОС Contiki

При проведении исследования нами использовался симулятор COOJA, в котором были выбраны сенсорный узел на базе платформы Skymote, выступающий в роли пограничного маршрутизатора в сети IPv6, и сенсорная сеть, содержащая 40 сенсорных узлов, расположенных случайным образом (рисунок 1.1) и выступающих в качестве отправителя. Пограничный маршрутизатор (шлюз) выполнял настройку префикса сети и инициировал создание дерева маршрутизации по протоколу RPL.

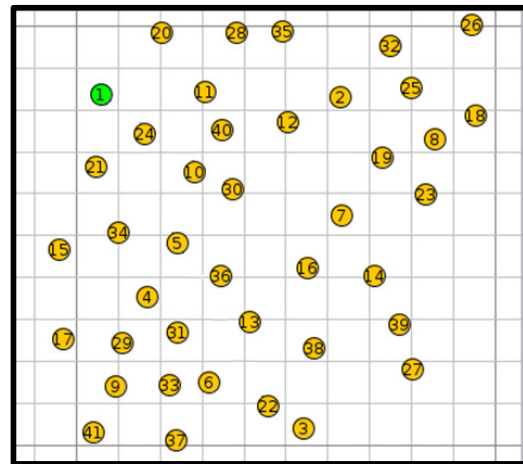


Рисунок 1.1 – Топология беспроводной сенсорной сети с 40 узлами

Было выполнено моделирование беспроводной сенсорной сети в симуляторе COOJA и произведено сравнение основных показателей производительности: различные режимы энергопотребления, количество отправленных пакетов, количество потерянных пакетов, ETX и количество переходов при подключении к шлюзу.

В таблице 1.1 представлены следующие обозначения: LPM Power – это режим низкого энергопотребления, когда сигнал на радиочастоте отсутствует (высокочастотный блок выключен), а микроконтроллер находится в режиме ожидания. CPU Power – это энергопотребление процессором. Listen Power – это энергопотребление в режиме прослушивания. Transmit Power – это энергопотребление в режиме пересылки. Power – это общее энергопотребление для всех режимов.

$$Power = CPU\ Power + LPM\ Power + Listen\ Power + Transmit\ Power \quad (1.1)$$

Результаты моделирования приведены в таблице 1.1 в порядке убывания общего энергопотребления для исследуемой сенсорной сети.

Исходя из результатов проведенного моделирования, можно отметить неравномерную балансировку нагрузки и, соответственно, более высокое потребление энергии некоторыми

сенсорными узлами. Так, в рассматриваемой топологии наибольшая нагрузка у сенсорного узла 5, для которого общее энергопотребление составляет 1,823 мВт за 10 минут исследования, что на 43% больше среднего энергопотребления для всех узлов. Также загруженными узлами будут узлы 36, 12, 38 и 19, для которых общее энергопотребление составляет 1,491 мВт., 1,464 мВт., 1,434 мВт и 1,401 мВт соответственно, что на 41%, 39%, 36%, 33 % больше среднего энергопотребления.

На рисунке 1.2 представлена сенсорная карта исследуемой сети.

Из приведенной сенсорной карты подключений можно заметить, что к узлу 5 подключилось большое количество сенсорных узлов по сравнению с другими узлами, так как узел 5 лучший по метрике ETX для всех подключенных к нему узлов.

Таблица 1.1 – Показатели производительности сенсорной сети из 40 узлов

Сенсорные узлы	CPU Power, мВт	LPM Power, мВт	ListenPower, мВт	TransmitPower, мВт	Power, мВт	Hop	ETX	Received	Lost
5	0,644	0,144	0,871	0,165	1,823	1	16	10	0
36	0,564	0,146	0,645	0,136	1,491	2	26,18	9	0
12	0,564	0,146	0,659	0,095	1,464	1	16	9	0
38	0,525	0,148	0,591	0,171	1,434	2	25,24	9	0
19	0,517	0,148	0,638	0,098	1,401	2	34,1	9	0
13	0,554	0,147	0,575	0,12	1,397	2	26,36	9	0
2	0,533	0,147	0,511	0,159	1,351	2	27,68	10	0
29	0,535	0,147	0,538	0,128	1,348	2	25,24	9	0
9	0,47	0,149	0,614	0,112	1,346	2	25,24	9	0
4	0,531	0,147	0,561	0,092	1,333	2	25,24	9	0
16	0,539	0,147	0,566	0,075	1,327	2	26,35	9	0
6	0,523	0,148	0,538	0,115	1,323	2	25,24	9	0
30	0,55	0,147	0,54	0,072	1,308	1	16	10	0
10	0,534	0,147	0,539	0,085	1,305	1	16	9	0
25	0,46	0,15	0,546	0,148	1,304	2	29,92	9	0
14	0,511	0,148	0,518	0,124	1,302	2	29,35	10	0
7	0,538	0,147	0,542	0,069	1,296	2	25,11	10	0
40	0,544	0,147	0,527	0,07	1,288	1	16	9	0
21	0,501	0,148	0,509	0,126	1,284	1	16	9	0
31	0,533	0,147	0,51	0,084	1,275	2	25,11	10	0
35	0,49	0,149	0,537	0,09	1,266	1	16	9	0
15	0,464	0,149	0,572	0,08	1,265	1	16	9	0
39	0,464	0,149	0,464	0,17	1,247	3	38,9	10	0
32	0,461	0,15	0,481	0,149	1,24	2	32,51	9	0
17	0,461	0,15	0,493	0,13	1,233	2	25,26	9	0
23	0,472	0,149	0,497	0,101	1,219	2	28,03	9	0
11	0,491	0,149	0,494	0,072	1,206	1	16	9	0
3	0,448	0,15	0,477	0,124	1,199	3	47,25	9	1
33	0,493	0,149	0,481	0,076	1,198	2	25,11	10	0
34	0,5	0,148	0,478	0,059	1,186	1	16	9	0
22	0,506	0,148	0,458	0,063	1,175	2	25,36	8	0
24	0,482	0,149	0,48	0,06	1,171	1	16	9	0
37	0,456	0,15	0,489	0,069	1,164	2	26,39	9	0
8	0,445	0,15	0,479	0,087	1,161	2	27,68	10	0
18	0,412	0,151	0,478	0,098	1,139	2	29,95	9	0
27	0,403	0,151	0,464	0,112	1,13	3	43,94	9	0
26	0,392	0,152	0,463	0,112	1,118	2	38,36	9	0
28	0,458	0,15	0,456	0,048	1,112	1	16	9	0
41	0,423	0,151	0,432	0,082	1,088	2	37,44	9	0
20	0,417	0,151	0,431	0,054	1,053	1	16	9	0
	0,495	0,149	0,529	0,102	1,274				

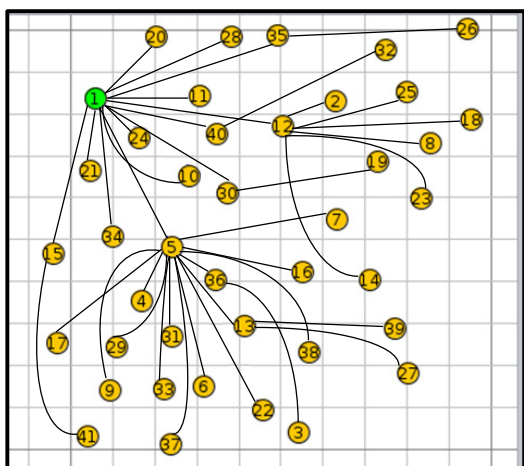


Рисунок 1.2 – Сенсорная карта подключения

Таким образом, недостатком протокола RPL является несбалансированная нагрузка, что приводит к тому, что к одному узлу может подключиться большое количество узлов и, как следствие, к расходованию большей энергии и разрядке батареи этого сенсорного узла. В нашем исследовании это узел 5. Все сенсорные узлы имеют батареи с ограниченным зарядом, батареи узлов с более высокой нагрузкой расходуют энергию быстрее и могут отключаться от беспроводной сенсорной сети. Как правило, такие узлы находятся близко к корню. После отключения разряженного узла, те узлы, которые использовали этот узел в своем маршруте, должны найти новый маршрут к корню, что увеличивает сетевой трафик и энергопотребление узлов и соответственно уменьшает время жизни беспроводной сенсорной сети.

Сетевая кластеризация – это один из методов снижения энергопотребления и увеличения срока службы сети. Общая беспроводная сенсорная сеть делится на разные кластеры (рисунок 1.3) [3]–[6].

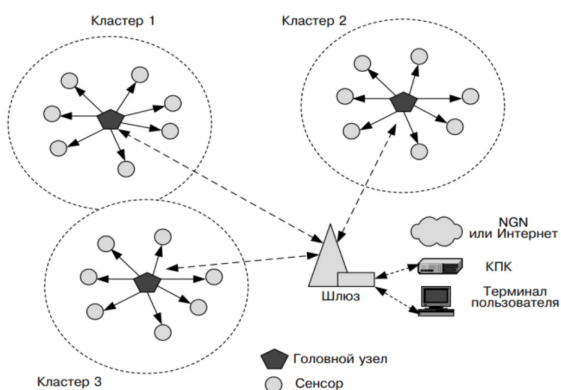


Рисунок 1.3 – Пример кластерной архитектуры

В нашем исследовании были выбраны четыре кластера. В каждом кластере в качестве

главного узла выбраны те узлы, где самое высокое значение остаточной энергии, т. е. те у которых наибольший процент заряда.

Остаточная энергия была рассчитана по следующей формуле:

$$\text{Остаточная энергия} = \text{Общая энергия} - \text{Количество потребляемой энергии узлами} \quad (1.2)$$

Количество потребляемой энергии узлами была рассчитана по следующей формуле:

$$\begin{aligned} \text{Количество потребляемой энергии узлами} = \\ = \text{CPU Power} + \text{LPM Power} + \text{Listen Power} + \\ + \text{Transmit Power} \end{aligned} \quad (1.3)$$

В протоколе RPL сообщение DIO содержит расстояние, номер версии, ранг и целевую функцию, которая используется для расчета ранга. Все узлы после получения сообщения DIO выбирают корень в качестве своего предпочтительного родителя, а затем вычисляют свой собственный ранг в соответствии с выбранной целевой функцией. Затем каждый узел отправляет свое сообщение DIO, содержащее его новый ранг всем своим соседям. Каждый узел после получения сообщения DIO проверяет свой ранг с присланным. Если полученный ранг выше, чем собственный, такое сообщение сбрасывается. Если же полученный ранг ниже, чем собственный, узел добавляет единицу к расстоянию идентификатор узла-отправителя в свою таблицу маршрутизации. Это расстояние позволяет рассчитать количество потомков на узел при построении DODAG и может использоваться для балансировки нагрузки.

В нашем исследовании изменим формулу расчета ранга, учитывая остаточную энергию для выбора главного узла в кластере.

$$\text{newRank} = \text{ETX} / \text{Остаточную энергию} \quad (1.4)$$

Узел с рангом ниже выбирается в качестве главного узла в кластере. Внесем изменение в функцию calculate_rank(). И выполним моделирование.

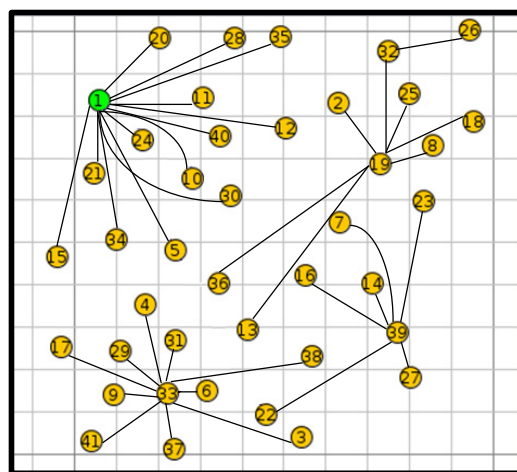


Рисунок 1.4 – Сенсорная карта подключения с использованием кластеризации

Результаты моделирования приведены в таблице 1.2 в порядке убывания общего энергопотребления для исследуемой сенсорной сети с измененным расчетом ранга. А результат подключения к главному узлу кластера показан на рисунке 1.4.

Проанализировав полученный результат, можно обратить внимание, что нет таких загруженных узлов, как в результатах, представленных в таблице 1.1 (узел 5). И общее количество затраченной энергии всеми узлами примерно одинаковое, что показывает лучшие результаты по балансировке нагрузки. Но количество подключенных узлов к кластерам оказалось неравномерным, что обуславливает необходимость

усовершенствования в дальнейшем самого алгоритма, добавив возможность подсчета подключенных узлов.

После выбора главных узлов кластера и формирования кластеров необходимо вычислить новый ранг для всех главных узлов в кластерах, которые будут отправлять данные на шлюз. Был проведен анализ нового ранга, используя для этого метрику ETX (рисунок 1.5).

ETX пути с 3 переходами со 100-процентной доставкой (процентной надежностью) равен 3, тогда как ETX пути с 2 переходами с 50-процентной доставкой равен 4. В нашем случае ETX пути с одним переходом со 100-процентной доставкой, т. е. на данном пути нет потерь пакетов, равен 1.

Таблица 1.2 – Показатели производительности сенсорной сети из 40 узлов с учетом расчета нового ранга

Сенсорные узлы	CPU Power, мВт	LPM Power, мВт	ListenPower, мВт	TransmitPower, мВт	Power, мВт	Hop	ETX	Received	Lost
36	0,543	0,147	0,545	0,051	1,287	1	16	11	0
10	0,538	0,147	0,511	0,089	1,286	1	16	11	0
13	0,54	0,147	0,514	0,072	1,273	1	16	11	0
24	0,525	0,148	0,49	0,096	1,258	1	16	11	0
31	0,536	0,147	0,53	0,044	1,258	1	16	11	0
16	0,533	0,147	0,511	0,064	1,255	1	16	11	0
30	0,541	0,147	0,501	0,048	1,237	1	16	11	0
40	0,532	0,147	0,504	0,048	1,232	1	16	11	0
4	0,526	0,148	0,484	0,064	1,221	1	16	11	0
35	0,494	0,149	0,502	0,075	1,22	1	16	11	0
7	0,533	0,147	0,472	0,065	1,217	1	16	11	0
12	0,534	0,147	0,487	0,047	1,216	1	16	10	0
6	0,511	0,148	0,467	0,078	1,204	1	16	11	0
5	0,532	0,147	0,48	0,041	1,201	1	16	10	0
23	0,469	0,149	0,471	0,107	1,197	1	16	11	0
38	0,514	0,148	0,478	0,058	1,197	1	16	11	0
2	0,512	0,148	0,472	0,049	1,182	1	16	11	0
34	0,527	0,148	0,461	0,043	1,179	1	16	11	0
11	0,49	0,149	0,453	0,079	1,171	1	16	11	0
29	0,526	0,148	0,454	0,043	1,17	1	16	10	0
22	0,511	0,148	0,452	0,054	1,164	1	16	10	0
15	0,473	0,149	0,491	0,049	1,162	1	16	11	0
14	0,501	0,148	0,458	0,05	1,157	1	16	11	0
21	0,489	0,149	0,45	0,049	1,136	1	16	11	0
26	0,39	0,152	0,44	0,149	1,131	2	27	10	1
28	0,434	0,15	0,477	0,052	1,113	1	16	11	0
9	0,463	0,149	0,443	0,047	1,103	1	16	11	0
17	0,452	0,15	0,443	0,048	1,092	1	16	11	0
37	0,458	0,15	0,425	0,055	1,087	1	16	11	0
18	0,407	0,151	0,449	0,079	1,086	1	16	11	0
25	0,425	0,151	0,44	0,066	1,083	1	16	11	0
32	0,435	0,15	0,43	0,045	1,061	1	16	11	0
3	0,44	0,15	0,432	0,038	1,06	1	16	11	0
8	0,422	0,151	0,436	0,042	1,051	1	16	11	0
20	0,415	0,151	0,424	0,047	1,037	1	16	11	0
41	0,415	0,151	0,41	0,04	1,016	1	16	11	0
27	0,401	0,151	0,413	0,042	1,007	1	16	11	0
	0,486	0,149	0,468	0,06	1,162				

2 Поиск оптимального маршрута

На рисунке 2.1 представлены возможные пути между главными узлами в кластере и шлюзом, а также значения ETX для всех путей. Так для узла 33 возможны несколько вариантов: $33 \rightarrow \text{GW}$, $33 \rightarrow 1 \rightarrow \text{GW}$, $33 \rightarrow 39 \rightarrow \text{GW}$ и это далеко не все возможные варианты путей. Наша задача состоит в нахождении наилучшего маршрута от каждого главного узла кластера до шлюза. Каждый узел рассчитывает ранг всех узлов в пределах диапазона передачи и отправит сообщение узлу с минимальным рангом. Был выполнен поиск оптимального маршрута в соответствии с алгоритмом, приведенном на рисунке 2.2, от каждого главного узла кластера до шлюза с учетом рассчитанного ранга.

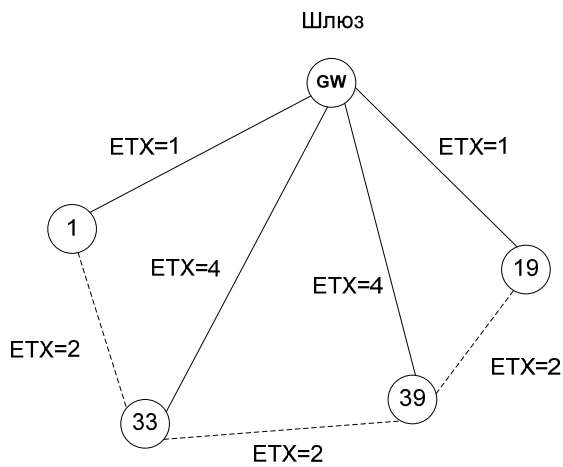


Рисунок 2.1 – Расчет ранга с учетом ETX

```

Node ID
Rank of Parents

Parent Lists for a Node X are P1, P2, P3, ..., Pn
New-Rank-Node=Infinity

1 for Parent(P) ∈ P1, P2, P3, ..., Pn do
2 NewRank(Child) = Rank(P)+ETX
3 if NewRank(Child) > Rank(Child) then
4 NewRank(Child) = Rank(Child)
5 Select_Parent = Preferred_Parent_ID
6 end if
7 end for
8 Return Select_Parent
    
```

Рисунок 2.2 – Алгоритм расчета ранга с учетом ETX

Так для главного узла кластера 33 таким маршрутом будет $33 \rightarrow 1 \rightarrow \text{GW}$ с рангом пути 3, для 39 – $39 \rightarrow 19 \rightarrow \text{GW}$ с рангом пути 3. Алгоритм на рисунке 1.6 находит наиболее надежный

путь, но не учитывает энергопотребление узлов, что важно для сети Интернета вещей. В этой связи был изменен расчет ранга с учетом энергопотребления (рисунок 2.3).

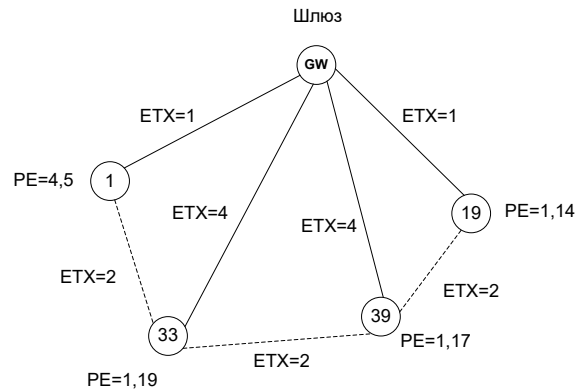


Рисунок 2.3 – Расчет ранга с учетом ETX и энергопотребления PE

На рисунке 2.3 представлены значения ETX для всех путей и общее энергопотребление для всех главных узлов в кластере. Был изменен расчет ранга в алгоритме, представленном на рисунке 2.3, добавив также общее энергопотребление. В измененном алгоритме изменилась только строка с расчетом ранга:

$$2 \quad \text{NewRank(Child)} = \text{Rank(P)} + (\text{ETX} * \text{EnergyAvg(p)})$$

Таким образом, наилучшим узлом будет узел, где ранг минимальный, т. е. этот путь более надежный и остаточная энергия наибольшая. Так, для главного узла кластера 33 таким маршрутом будет $33 \rightarrow \text{GW}$ с рангом пути 4,56, для 39 – наилучший маршрут $39 \rightarrow 19 \rightarrow \text{GW}$ с рангом 3,42.

Наилучшие пути для главного узла кластера 33 по двум приведенным алгоритмам оказались разными: когда учитывается энергопотребление путь $33 \rightarrow 1 \rightarrow \text{GW}$ имеет ранг 6,88, поскольку данный узел более истощен по сравнению с другими узлами, а ранг пути $33 \rightarrow \text{GW}$ – равен 5,56. При учете только метрики ETX путь $33 \rightarrow 1 \rightarrow \text{GW}$ имеет ранг 3, а ранг пути $33 \rightarrow \text{GW}$ – равен 4. А наилучшим будет тот путь, где ранг минимальный, поэтому маршруты будут отличаться. Таким образом, когда необходимо более надежная доставка ранг необходимо рассчитывать по алгоритму, приведенному на рисунке 2.3, когда же необходимо учитывать и выбирать узел с наибольшим количеством остаточной энергии, ранг необходимо рассчитывать по измененной формуле.

Заключение

Протокол RPL обладает рядом достоинств при использовании в промышленном Интернет вещей, но, как показало проведенное моделирование, потребление энергии узлами не

сбалансировано. Чтобы исправить этот недостаток, было предложено использовать кластеризацию и, при формировании кластеров, выбирать узел с наивысшим значением остаточной энергии.

Также предложены два алгоритма определения ранга для маршрутизации от главных узлов кластера к шлюзу, учитывающие метрику ETX и общее энергопотребление.

ЛИТЕРАТУРА

1. *A Load-balancing Clustering Algorithm of WSN for Data Gathering* / Han Zhang [et al.] // IEEE 2nd International Conference on Artificial Intelligence, Management Science and Electronic Commerce. – 2011. – P. 915–918.

2. *Евстифеева, Е.А.* Методика выбора головного кластерного узла в беспроводной сенсорной сети на основе нечеткой логики / Е.А. Евстифеева, В.Д. Семейкин // Вестник АГТУ. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. – 2018. – № 1. – С. 81–89.

3. *Singh, A.K.* Fuzzy Logic based Clustering in Wireless Sensor Networks: A Survey / A.K. Singh,

N. Purohit, S. Varma // International Journal of Electronics. – 2012. – Vol. 100, iss. 1. – P. 126–141.

4. *Lee, J.S.* Fuzzy-Logic-Based Clustering Approach for Wireless Sensor Networks Using Energy Predication / J.-S. Lee, W.-L. Cheng // IEEE Sensors Journal. – 2012. – Vol. 12, № 9. – P. 2891–2897.

5. *Махров, С.С.* Нейросетевая кластеризация узлов беспроводной сенсорной сети / С.С. Махров // Т-Comm. – 2014. – № 6. – С. 31–35.

6. *Татарникова, Т.М.* Алгоритм роя пчел выбора головных узлов кластеров беспроводной сенсорной сети / Т.М. Татарникова, Ф. Бимбетов, Е.В. Горина // Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ». – 2022. – Т. 15, № 3. – С. 15–22.

Поступила в редакцию 01.08.2023.

Информация об авторах

Лавиук Ольга Александровна – аспирантка

Листопад Николай Измайлович – д.т.н., профессор

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ СЛОИСТОГО ДОРОЖНОГО ПОКРЫТИЯ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

А.О. Шимановский, Д.А. Купреева

Белорусский государственный университет транспорта, Гомель

MODELING OF THE LAYERED PAVEMENT DEFORMATION CONSIDERING THE TEMPERATURE CHANGE

A.O. Shimanovsky, D.A. Kupreyeva

Belarusian State University of Transport, Gomel

Аннотация. Выполнен анализ напряжений и деформаций в асфальтобетонном покрытии, возникающих под действием давления колес проезжающих автомобилей. Учитывается изменение модулей упругости материалов верхних слоев, обусловленное изменением температуры по высоте. На основе решения задачи термоупругости в среде программного комплекса конечноэлементного моделирования ANSYS установлено распределение температур, напряжений и деформаций в слоях дорожного покрытия. Продемонстрировано, что снижение жесткости материалов верхних слоев при нагреве поверхности дороги ведет к существенному изменению картины распределения напряжений и деформаций.

Ключевые слова: дорожное покрытие, асфальтобетон, термоупругость, конечно-элементное моделирование, напряженно-деформированное состояние.

Для цитирования: Шимановский, А.О. Моделирование деформирования слоистого дорожного покрытия с учетом изменения температуры / А.О. Шимановский, Д.А. Купреева // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 81–86. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_81. – EDN: SIRIJL

Abstract. The analysis of stresses and deformations in the asphalt concrete pavement, arising under the action of the pressure of the wheels of passing cars, is carried out. There is taken into account the change in the elastic moduli of the upper layers materials, due to the change in temperature along the height. Based on the solution of the thermoelasticity problem in the ANSYS finite element modeling software package, the distribution of temperatures, stresses and strains in the pavement layers is obtained. It is shown that the decrease in the stiffness of the upper layers materials leads to a significant change in the pattern of stress and strain distribution when the road surface is heated.

Keywords: pavement, asphalt concrete, thermoelasticity, finite element modeling, stress-strain state.

For citation: Shimanovsky, A.O. Modeling of the layered pavement deformation considering the temperature change / A.O. Shimanovsky, D.A. Kupreyeva // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 81–86. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_81 (in Russian). – EDN: SIRIJL

Введение

Дорожная одежда должна сохранять свою прочность под действием нагрузок от проезжающих автомобилей, а ее поверхность не должна пластически деформироваться в течение расчетного срока службы. Помимо давления от транспортных средств, автомобильные дороги подвергаются воздействию многочисленных факторов окружающей среды (увлажнение выпадающими осадками, промерзание и оттаивание и др.).

На формирование условий работы дорожных одежд большое влияние оказывает изменение температуры воздуха в месте расположения автодороги. Анализ, проведенный в [1] для условий Эстонии, показал, что температуры дорожного покрытия за последние 30 лет менялись в диапазоне от -34 до $+58$ °С. В работе [2] показано, что температура на территории Китая выросла за последние десятилетия на 2–4 градуса, а температура поверхности дороги в некоторых

случаях оказывается на 50° большей температуры основания. Также в ней рассмотрено влияние температуры на модуль упругости асфальтобетона и его коэффициент Пуассона. Увеличение температуры поверхности дороги приводит к существенному снижению модуля упругости асфальтобетона, что ведет к перераспределению напряжений в дорожном покрытии и может стать причиной его преждевременного выхода из строя.

В работе [3] анализируется диапазон изменения модулей упругости мелкозернистых и крупнозернистых асфальтобетонов при разных температурах и длительностях нагружения. Отмечается, что для анализа прочности дорожных покрытий важно иметь близкие к точным значения параметров жесткости слоев. Обоснование значений модулей упругости асфальтобетонов для расчёта дорожной одежды по критерию растяжения при изгибе под кратковременными нагрузками представлено в статье [4].

В статье [5] предлагается методика, позволяющая учесть влияние различных параметров асфальтобетона на его динамический модуль упругости. На основании экспериментальных данных в [6] подобраны различные сигмоидальные функции, характеризующие зависимость динамического модуля упругости асфальтобетона от температуры и частоты нагружения.

В ходе испытаний, описанных в работе [7], установлено, что существующие эмпирические формулы дают значительную погрешность определения модуля упругости после 500 с нагружения при температуре -10°C . Статистический анализ полученных в исследовании [8] данных показал, что после нескольких тысяч циклов нагружения модуль упругости материала снижается на 30% и более, причем на сопротивление термической усталости существенное влияние оказывают состав асфальтобетона и размер фракции его составляющих. На основе анализа механических характеристик асфальтобетона в условиях Румынии в [9] установлено, что повышение температуры воздуха с 11 до 30°C ведет к увеличению числа усталостных повреждений в 15 раз.

В статье [10] выполнен экспериментальный анализ влияния соотношения битума и цемента на модуль упругости и предел прочности цементобетона с дисперсным битумом при разных температурах. Методика прогнозирования механических характеристик такого цементобетона в зависимости от содержания его составных элементов предложена в работе [11].

Точность результатов определения температуры асфальтобетонных покрытий по эмпирически полученным выражениям анализируется в статье [12]. Приведены рекомендации по рациональному использованию рассматриваемых формул.

Имеется ряд публикаций, посвященных расчетам напряжений в дорожных покрытиях, связанных с наличием тепловых явлений. В работе [13] для определения деформаций дорожной одежды предложен подход, позволяющий на первом этапе определить распределение температур по высоте поперечного сечения, а на втором найти эквивалентные модули упругости, соответствующие данному распределению температур. Данный подход использован также в статье [14]. Сравнение температурных деформаций, вычисленных на основе различных эмпирических зависимостей для модулей упругости, с результатами экспериментов выполнено в работе [15]. Экспериментально найденные значения оказались несколько большими, чем определенные расчетом.

Экспериментально-теоретический анализ распределения температур и напряжений в трех типах дорожных покрытий при проезде автомобиля проведен в работе [16]. Установлено, что на

напряжения и деформации в слоях дорожного покрытия существенно влияют как нелинейно изменяющийся градиент температуры, так и условия взаимодействия колес с дорогой, а наилучшие условия имеют место при движении тяжелых автомобилей с малой скоростью.

В работе [17] проанализированы деформации асфальтового покрытия при суточных перепадах температур. Принималось, что температура на поверхности покрытия изменяется от $+25^{\circ}\text{C}$ до $+60^{\circ}\text{C}$. Выполнено сравнение экспериментальных данных с результатами расчета по модели, учитывающей связь изменения температуры и вязкоупругих деформаций в материале покрытия. В статье [18] выполнено сравнение моделей упругого и вязкоупругого деформирования дорожного покрытия под действием проезжающих автомобилей при температурах до 50°C . Отмечается, что при температурах, превышающих 30°C , разница между результатами вычислений оказывается значительной и может существенно влиять на расчетное значение долговечности. Проведенный в работе [19] экспериментальный анализ причин образования колеи при высоких температурах показал, что значительную роль здесь играют механические характеристики второго и третьего слоев дорожного покрытия.

Экспериментально анализируется деформирование образца при понижении температуры в работе [20]. Показано, что существующие теоретические модели недостаточно точно отражают изменение температурных напряжений в материале при отрицательных температурах.

В статье [21] проведена серия расчетов, связанных с моделированием методом конечных элементов распространения трещины в дорожном покрытии. Показана высокая вероятность образования микротрещин на границах слоев дорожного покрытия. В работе [22] выполнено конечноэлементное моделирование с целью анализа влияния суточного изменения температуры поверхности дороги на распространение трещин в ней.

Таким образом, существует необходимость в уточненном определении напряжений и деформаций в дорожной одежде, связанных с изменением температуры окружающей среды. Целью представленной работы является установление влияния зависимости модуля упругости верхних слоев дорожного покрытия от температуры на напряженно-деформированное состояние дорог \square категории, интенсивность движения по которым составляет от 2 000 до 5 000 автомобилей в сутки.

1 Методика численного моделирования

Рассматривается участок дороги, поперечное сечение которой представлено на рисунке 1.1. Предполагается, что дорожная одежда включает

Таблица 1.1 – Физико-механические характеристики слоев дорожной одежды (при 20° С)

Номер слоя	Толщина, см	Плотность, кг/м ³	Модуль упругости, МПа	Коэффициент Пуассона	Коэффициент температурного расширения, 1/°С	Удельная теплоемкость, кДж/кг·К	Коэффициент теплопроводности, Вт/м·К
1	4	2300	3336	0,3	10 ⁻⁵	1,65	1,4
2	4	2300	2944	0,25	10 ⁻⁵	1,65	1,25
3	14	2000	330	0,25	10 ⁻⁵	1,65	1
4	48	1700	205	0,15	10 ⁻⁵	1,00	0,64

четыре слоя, которые сформированы из разных материалов. Их физико-механические характеристики аналогичны использованным в [23] (таблица 1.1). Зависимости модулей упругости асфальтобетонных слоев от температуры приняты в соответствии с [13] и приведены на рисунке 1.2. Изменение механических характеристик слоев 3 и 4 при их нагреве незначительно, и им можно пренебречь.

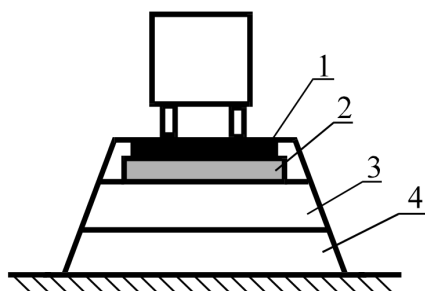


Рисунок 1.1 – Расчетная модель дорожной одежды:

- 1 – плотный асфальтобетон;
- 2 – пористый асфальтобетон;
- 3 – фракционированный щебень;
- 4 – гравийная смесь

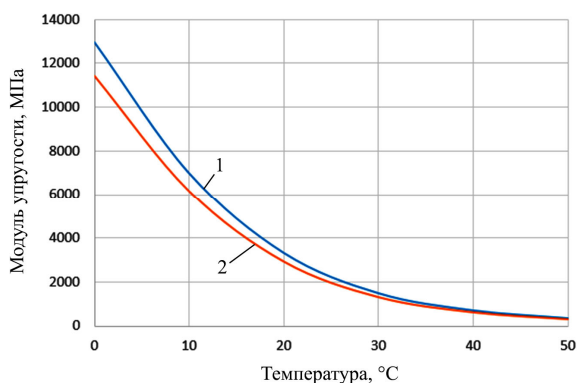


Рисунок 1.2 – Зависимости модулей упругости материалов от температуры, цифра у линии соответствует номеру слоя

При расчетах дорожных покрытий используется допущение, что давление от шины на участок дороги равномерно распределяется по круговой площадке. При движении автомобиля на дорогу одновременно оказывают воздействие

несколько шин. Наиболее неблагоприятным является случай, при котором рядом в одном направлении движутся два автомобиля. В этом случае можно считать, что нагрузки по длине и ширине дорожного полотна приложены периодически [23], [24]. Поэтому в качестве расчетной области рассматривается структурный элемент, содержащий участок, который включает одну четвертую области приложения нагрузки. Он имеет вид параллелепипеда, который включает несколько слоев дорожного покрытия с различными физико-механическими характеристиками (рисунок 1.3).

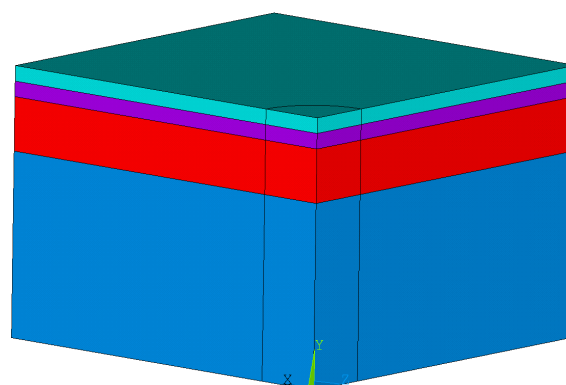


Рисунок 1.3 – Структурный элемент дорожного покрытия

Конечно-элементная модель выделенного структурного элемента дорожного полотна была создана в программном комплексе ANSYS. Учитывая необходимость проведения связанного статического и температурного анализа, использован 20-узловой шестигранный элемент SOLID226, который дает возможность учета особенностей мультифизического анализа. Конечно-элементная сетка создавалась в полуавтоматическом режиме, при этом число конечных элементов модели составило около 7000.

В качестве нагрузки к четверти круга на поверхности модели, радиус которого принимался равным 17 см, прикладывалось равномерно распределенное давление 600 кПа, соответствующее действию шины. В качестве граничных условий применены: запрет перемещений по вертикали для нижней поверхности нижнего слоя и

симметрия для всех боковых поверхностей параллелепипеда. Также для поверхности слоя 1 задавались различные значения относительных температур T_n из диапазона от 0 до $+50^\circ\text{C}$.

В ходе расчета осуществлялось решение связанных уравнений термоупругого деформирования [25]:

$$\{\varepsilon\} = [D]^{-1} \{\sigma\} + \{\alpha\} \Delta T;$$

$$S = [\alpha]^t \{\sigma\} + \frac{\rho C_p}{T_0} \Delta T,$$

где $\{\varepsilon\}$ – вектор полной деформации; $[D]$ – матрица жесткости; $\{\sigma\}$ – вектор напряжения; $\{\alpha\}$ – вектор коэффициентов теплового расширения (верхний индекс t использован для обозначения соответствующей транспонированной матрицы); ΔT – изменение температуры относительно эталонной температуры (она предполагается равной 0°C), К; S – плотность энтропии; ρ – плотность материала; C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении; T_0 – абсолютная эталонная температура, К.

2 Анализ результатов расчетов

В ходе выполнения расчетов получены значения температур, напряжений и деформаций в слоях дорожного покрытия.

На рисунке 2.1 представлены графики, демонстрирующие изменение температур по высоте дороги при разных температурах ее поверхности. Они показывают, что наибольший градиент температуры по высоте дорожной одежды имеет место в верхних наиболее плотных и жестких ее слоях.

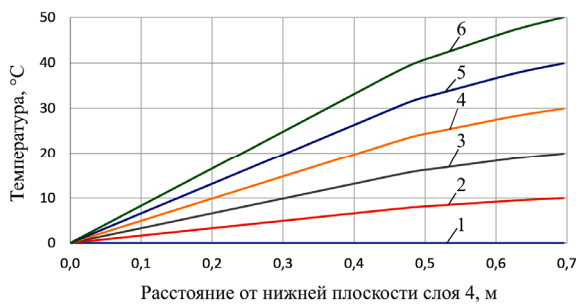


Рисунок 2.1 – Изменение температур по высоте дорожного покрытия при разных температурах T_n поверхности

Схемы распределения напряжений, представленные на рисунке 2.2, показывают, что при одинаковой температуре во всех слоях дороги верхние два слоя асфальтобетона работают как балка на упругом основании, воспринимая нагрузку от движущегося автомобиля. Учитывая достаточно высокий модуль упругости асфальтобетона, в этом случае имеем максимальное напряжение в нем, которое составляет 2730 кПа. Увеличение температуры поверхности дороги,

которое сопровождается снижением модулей упругости верхних двух слоев, приводит к существенному изменению картины распределения напряжений. Теперь максимальные их значения наблюдаются как под центром площадки приложения нагрузки, так и на краях этой области. Снижение уровня максимальных напряжений слоев асфальтобетона при увеличении температуры связано с существенным уменьшением их модулей упругости.

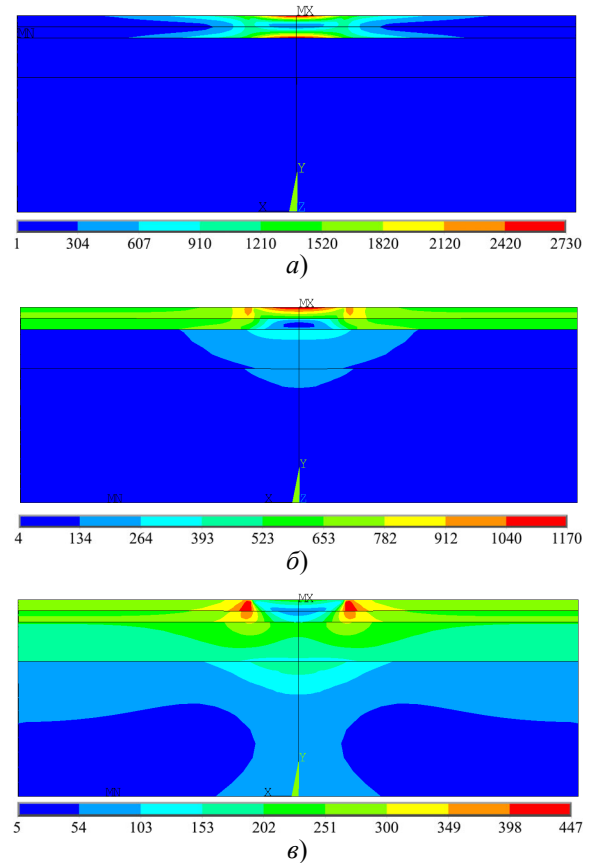


Рисунок 2.2 – Эквивалентные по Мизесу напряжения, кПа, при температурах: а) $T_n = 0^\circ\text{C}$; б) $T_n = +30^\circ\text{C}$; в) $T_n = +50^\circ\text{C}$

Анализ схем распределения деформаций (рисунок 2.3) показывает, что при нулевой температуре поверхности все точки дорожного покрытия смещаются вниз, а наибольшие смещения наблюдаются, главным образом, в асфальтобетонных слоях под местом приложения нагрузки. Увеличение температуры поверхности, а вместе с ней и температур всех слоев, приводит к увеличению толщины дорожного покрытия вследствие температурного расширения. По этой причине максимальные положительные деформации наблюдаются в верхних угловых точках данной модели. В то же время область с минимальными значениями перемещений, которая соответствует наибольшим деформациям, под действием приложенной нагрузки распространяется не только на асфальтобетонное покрытие,

но и на третий слой фракционированного щебня. Такой результат согласуется с данными, приведенными в работе [19].

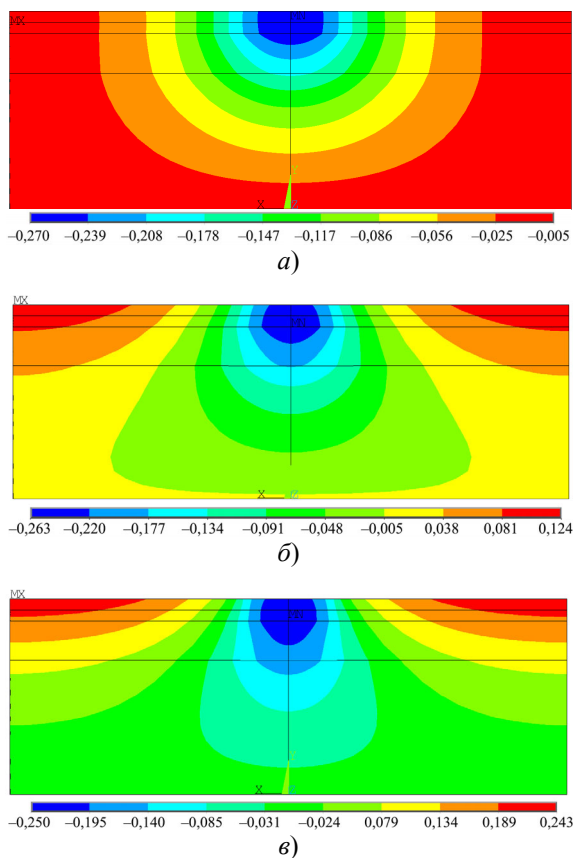


Рисунок 2.3 – Вертикальные перемещения точек дорожного покрытия, мм, при температурах: а) $T_n = 0^\circ \text{C}$; б) $T_n = +30^\circ \text{C}$; в) $T_n = +50^\circ \text{C}$

Заключение

В работе представлены результаты конечно-элементного моделирования термоупругого деформирования дороги I категории под действием нагрузки от движущихся автомобилей. Показано, что при низких температурах асфальтобетонное покрытие работает как балка на упругом основании. Связанное с увеличением температуры поверхности дороги уменьшение модуля упругости асфальтобетона приводит к перераспределению напряжений и значительному увеличению деформаций под местом приложения нагрузки. Такой результат может свидетельствовать о формировании колеи на дорожном покрытии. Полученные результаты могут быть использованы при совершенствовании конструкций автомобильных дорог.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Kontson, K.* Superpave Pavement Design Temperatures in Estonia / K. Kontson, K. Lill, A. Aavik // *The Baltic Journal of Road and Bridge Engineering*. – 2023. – Vol. 18, № 2. – P. 190–204.

2. *Influence of regional climate change on summer temperature effect of asphalt pavement* / J. Fu [et al.] // *Journal of Chongqing Jiaotong University (Natural Science)*. – 2020. – Vol. 39, № 2. – P. 87–94.

3. *Телтаев, Б.Б.* Анализ расчетных значений модуля упругости асфальтобетонов / Б.Б. Телтаев // *Дорожная техника 2010*. – СПб.: Славутич, 2010. – С. 130–137.

4. *Обоснование расчётных характеристик асфальтобетонов по ГОСТ Р 58406.2-2020 при проектировании дорожных одежд на растяжение при изгибе* / Н.В. Косенко [и др.] // *Автомобиль. Дорога. Инфраструктура*. – 2022. – № 2 (32). – 15 с.

5. *Кириллов, А.М.* Моделирование изменения модуля упругости асфальтобетона при нагружении / А.М. Кириллов, М.А. Завьялов // *Инженерно-строительный журнал*. – 2015. – № 2. – С. 70–76.

6. *Кирюхин, Г.Н.* Эффективная модель модуля упругости асфальтобетона / Г.Н. Кирюхин // *Вестник Кыргызского государственного университета строительства, транспорта и архитектуры им. Н. Исанова*. – 2016. – № 1. – С. 78–84.

7. *Jaczeowski, M.* Asphalt concrete subjected to long-time loading at low temperatures – Deviations from the time-temperature superposition principle / M. Jaczeowski, J. Judycki, P. Jaskula // *Construction and Building Materials*. – 2019. – Vol. 202. – P. 426–439.

8. *Arabzadeh, A.* Thermal fatigue behavior of asphalt concrete: A laboratory-based investigation approach / A. Arabzadeh, M. Guler // *International Journal of Fatigue*. – 2019. – Vol. 121. – P. 229–236.

9. *Răcănel, C.* Considerations regarding the influence of climatic conditions on pavement with asphalt layers / C. Răcănel, A. Burlacu // *Recent Advances in Civil and Mining Engineering: Proceedings of the 4th European Conference of Civil Engineering (ECCIE'13)*. – Antalya, 2013. – P. 141–147.

10. *Influences of temperature on mechanical properties of cement asphalt mortars* / X. Kong [et al.] // *Materials and Structures*. – 2014. – Vol. 47. – С. 285–292.

11. *Ouyang, J.* Modeling Mechanical Properties of Cement Asphalt Emulsion Mortar with Different Asphalt to Cement Ratios and Temperatures / J. Ouyang, J. Zhao, Y. Tan // *Journal of Materials in Civil Engineering*. – 2018. – Vol. 30, iss. 10. – Article 04018263. – 10 p.

12. *Тешаев, Э.А.* Исследование влияния годовых колебаний температуры на деформационные характеристики асфальтобетонных покрытий / Э.А. Тешаев, М.М. Жалалдинов, Г.Б. Эргешова // *Наука. Образование. Техника*. – 2015. – № 1. – С. 44–51.

13. *Wolfe, R.K.* Standardized Elastic Moduli of Pavement Layers for Overlay Design / R.K. Wolfe, B.W. Randolph, D.C. Colony // *Journal of*

Transportation Engineering. – 1995. – Vol. 121, № 2. – P. 221–232.

14. *Vassoler, G.* Comportamento mecânico de pavimentos flexíveis submetidos a gradientes térmicos / G. Vassoler, W. Chong, L.P. Specht // *Acta Scientiarum. Technology.* – 2011. – Vol. 33, № 3. – P. 265–271.

15. *Ramos García, J.A.* Analysis of the temperature influence on flexible pavement deflection / J.A. Ramos García, M. Castro // *Construction and Building Materials.* – 2011. – Vol. 25, iss 8. – P. 3530–3539.

16. *Numerical investigation of the mechanical response of semi-rigid base asphalt pavement under traffic load and nonlinear temperature gradient effect* / O.C. Assogba [et al.] // *Construction and Building Materials.* – 2020. – Vol. 235. – Article 117406. – 25 p.

17. *Dynamic behavior of asphalt pavement structure under temperature-stress coupled loading* / Q. Xue [et al.] // *Applied thermal engineering.* – 2013. – Vol. 53, № 1. – P. 1–7.

18. *Mejzun, Ł.* Comparison of elastic and viscoelastic analysis of asphalt pavement at high temperature / Ł. Mejzun, J. Judycki, B. Dołżycki // *Procedia Engineering.* – 2017. – Vol. 172. – C. 746–753.

19. *Research on the high temperature performance of asphalt pavement based on field cores with different rutting development levels* / N. Li [et al.] // *Materials and Structures.* – 2021. – Vol. 54. – C. 1–12.

20. *Gajewski, M.A.* Prediction of asphalt concrete low-temperature cracking resistance on the

basis of different constitutive models / M.A. Gajewski, P. Langlois // *Procedia Engineering.* – 2014. – Vol. 91. – P. 81–86.

21. *Dave, E.V.* Thermal reflective cracking of asphalt concrete overlays / E.V. Dave, W.G. Buttlar // *International Journal of Pavement Engineering.* – 2010. – Vol. 11, № 6. – P. 477–488.

22. *Thermal fatigue and cracking behaviors of asphalt mixtures under different temperature variations* / Y. Luo [et al.] // *Construction and Building Materials.* – 2023. – Vol. 369. – Article 130623. – 16 p.

23. *FEM Modelling of the Temperature Influence on the Stress-Strain State of the Pavement* / A. Shimanovsky [et al.] // *Komunikacie.* – 2023. – Vol. 25, № 1. – P. D1–D9.

24. *Цыганок, О.И.* Деформирование дорожной одежды при разных температурах ее поверхности / О.И. Цыганок, И.Е. Кракова, А.О. Шимановский // *Механика. Исследования и инновации.* – 2022. – Вып. 15. – С. 227–234.

25. *Nye, J.F.* Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices / J.F. Nye. – Oxford: Clarendon Press, 1957. – 322 p.

Поступила в редакцию 04.08.2023.

Информация об авторах

Шимановский Александр Олегович – д.т.н., профессор
Курцева Дарья Андреевна – студентка

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ПЕРЕКРЕСТКОМ АВТОМОБИЛЬНЫХ ДОРОГ

Е.И. Сукач, М.В. Биза

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

INTELLIGENT CONTROL SYSTEM FOR ROAD INTERSECTION

E.I. Sukach, M.V. Biza

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Иллюстрируется подход к созданию интеллектуальных систем управления объектами с использованием машинного обучения с подкреплением на примере системы управления перекрестком. Описывается имитационная модель перекрестка, выбранная в качестве среды обучения. Приводятся результаты сравнительного анализа эффективности работы различных алгоритмов обучения. Приводятся результаты применения градиента политики Монте-Карло для обучения модели перекрестка.

Ключевые слова: транспортная сеть, машинное обучение с подкреплением, нейронные сети, пропускная способность, безопасность, системы управления, градиент политики.

Для цитирования: Сукач, Е.И. Интеллектуальная система управления перекрестком автомобильных дорог / Е.И. Сукач, М.В. Биза // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 87–93. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_87. – EDN: UQUVAZ

Abstract. An approach to the creation of intelligent object control systems using machine learning with reinforcement is illustrated using the example of an intersection control system. The simulation model of the intersection, chosen as the learning environment, is described. The results of a comparative analysis of the performance of various learning algorithms are presented. The results of applying the Monte Carlo policy gradient to train the intersection model are presented.

Keywords: transport network, reinforcement learning, neural networks, throughput, security, control systems, policy gradient.

For citation: Sukach, E.I. Intelligent control system for road intersection / E.I. Sukach, M.V. Biza // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 87–93. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_87 (in Russian). – EDN: UQUVAZ

Введение

Перекресток автомобильных дорог является одним из самых загруженных участков транспортной сети (ТС), на функционирование которого оказывает влияние много случайных факторов. Управление обслуживанием транспортных и пешеходных потоков обычно регулируется светофорами, параметры работы которых зачастую не учитывают динамику изменения интенсивности динамических потоков. В результате образуются транспортные пробки, приводящие к росту временных и денежных затрат на перемещение транспортных единиц, росту аварий и ухудшению экологической обстановки. Поэтому актуальна проблема разработки программных средств, позволяющих обосновать выбор режима управления движением на перекрестке с учетом изменяющейся транспортной и пешеходной нагрузки на исследуемый участок ТС.

Одним из наиболее часто используемых методов оценки пропускной способности ТС является метод имитационного моделирования, позволяющий исследовать динамику функционирования объектов на высоком уровне детализации

с учетом вероятностных параметров перемещения транспортных единиц и изменяющихся условий внешней среды [1]. Разработанные авторами модели позволяют выбрать рациональный вариант структурной организации функционирования ТС с учетом заданного пользователем критерия, определить величину максимального потока и распределение транзитных потоков по сети с учетом вероятностных параметров нагрузки на сеть. При этом динамика обслуживания транспорта на перекрестках не исследовалась. Разработка детальной имитационной модели перекрестка автомобильных дорог позволит пополнить библиотеку параметризованных имитационных моделей программного комплекса «TRANZIT» [2] и расширить класс решаемых задач с использованием новой модели.

В статье рассматриваются вопросы создания интеллектуальной системы управления перекрестком автомобильных дорог с использованием обучения с подкреплением. Основой разработанной системы является имитационная модель «Перекресток», реализованная в современной среде имитационного моделирования

AnyLogic Personal Learning Edition 8.8.2, представляющей огромный выбор компонентов и функционала для создания имитационных моделей [3]. Модель «Перекресток» выступает в качестве среды для реализации обучения с подкреплением (RL, reinforcement learning) – области машинного обучения, в которой обучение происходит через взаимодействия с окружающей средой. При этом обучаемый получает информацию о последствиях своих действий, а не о том, какие действия следует выполнять [4].

Применение современных средств разработки программного обеспечения [5] и опыт разработчиков позволили реализовать различные алгоритмы обучения с подкреплением, которые были использованы для обучения среды «Перекресток», превращающие её в интеллектуальную систему, адаптирующуюся под изменяющуюся транспортную нагрузку.

1 Имитационная модель «Перекресток»

Для создания модели перекрёстка был использован участок дороги, представленный на рисунке 1.1. Предполагалось, что пересекающиеся дороги имеют двустороннее движение, по две полосы движения в каждом направлении. С помощью библиотеки «Презентация» среды моделирования было добавлено изображение, которое использовалось в качестве основы будущей модели «Перекрёсток».

Для организации моделирования перекрёстка была выполнена формализация объекта: размечены дороги, настроены светофоры, задана интенсивность поступления потоков машин и параметры появления потоков пешеходов.

Блок «Дорога» из Библиотеки дорожного движения [6] позволил сделать необходимую разметку дороги. В свойствах созданной дороги было выбрано число полос основного и встречного движения, определён цвет и покрытие дороги, задана ширина дороги и другие её параметры.

Случайный процесс перемещения транспортных средств и пешеходов на перекрёстке также был определён с использованием Библиотеки

дорожного движения среды AnyLogic, позволяющей планировать и прогнозировать перемещение динамических потоков в ТС. Описание объекта было выполнено с использованием диаграмм процессов, которые формировались с использованием функции ‘drag-and-drop’. Динамические единицы (транспортные средства и пешеходы) представлены в виде агентов, имеющих индивидуальные физические параметры.

Для описания логики движения пешеходов были созданы агенты «Pedestrian», которые затем были использованы в элементах, участвующих в моделировании пешеходных потоков и задающих интенсивность появления пешеходов, направление их перемещения, скорость перемещения и другие параметры. Элемент «Ped Source» отвечал за создание пешеходов, «Ped Select Out» определял направления пешеходов по определённым заранее вероятностям или условиям на один из пяти выходных портов, «Ped Sink» служил для удаления пешеходов, «Ped Go To» переводил пешеходов в заданное заранее с помощью целевой линии, области или точки место моделируемого пространства. Движение пешехода заканчивалось при пересечении заданного конечного пункта. С помощью элемента «Многоугольный узел» секции «Разметка пространства» было задано допустимое поведение пешеходов на дороге и на светофорах, указано, при каких фазах пешеходам можно переходить дорогу, а при каких не следует (рисунок 1.2).

Формирование транспортных потоков было задано с использованием элементов «Car Source», «Car Move To», «Car Dispose» Библиотеки дорожного движения. Элемент «Car Source» создаёт автомобили и помещает их в указанное место дорожной сети, «Car Move To» управляет движением созданных машин, а «Car Dispose» удаляет данные машины из модели. Автомобиль едет только тогда, когда он находится в блоке «Car Move To». В свойствах этих элементов была задана интенсивность прибытия транспортных единиц, указывалось, на какой дороге они появляются, по какой полосе едут и

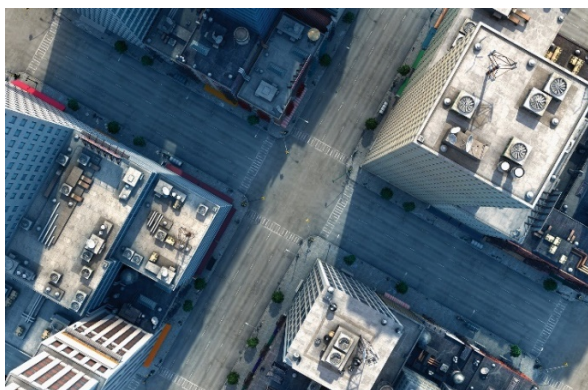


Рисунок 1.1 – Фотография перекрёстка автомобильных дорог

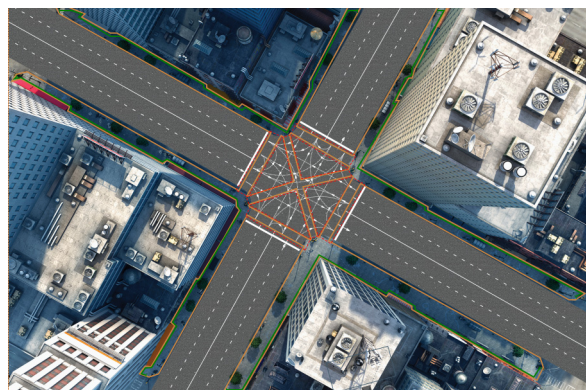


Рисунок 1.2 – Разметка модели «Перекрёсток»

куда направляются, определены параметры поведения динамических единиц (агентов) при поступлении в сеть, не нахождении пути и при выходе из сети.

Диаграммы, отражающие пример логики движения машин в модели «Перекрёсток», приведены на рисунках 1.3 и 1.4 (данные диаграмм задают одно и то же движение транспортных потоков).

Для регулирования движения транспорта была определена логика работы светофоров. Для этого в секцию «Блоки» Библиотеки дорожного движения был добавлен блок «Traffic Light». В свойствах «Traffic Light» были рассмотрены различные режимы работы для стоп-линий и для соединителей полос перекрёстка. Варьировались настройки длительности каждой из фаз светофоров. При запуске моделирования указывались начальные значения времени фаз светофоров, во время имитации эти значения изменялись, что позволило оптимизировать работу светофоров. В блоке «Road Network Description» были включены отображения пробок для более наглядной

симуляции дорожного движения. Кроме того, данный блок использовался для получения доступа к управлению транспортными единицами, находящимися в моделируемой дорожной сети. Были исследованы возможности выбора различных действий, которые выполнялись при добавлении автомобиля в дорожную сеть, въезде на дорогу и др.

Для сбора статистики по времени перемещения всех машин в ТС была создана популяция агентов с параметром «времяПоявления», для которых вычислялось «времяПроезда» при завершении их перемещения в сети. Для отображения результатов моделирования использовалась «Гистограмма» из секции «Диаграммы» палитры «Статистика». Для более чёткого понимания о загруженности ТС в целом вычислялось среднее время проезда, которое отображалось на графике. Кроме этого, вычислялось время, которое транспортные единицы провели на определённых участках перекрёстка и которое в процессе имитации отображалось на графиках.

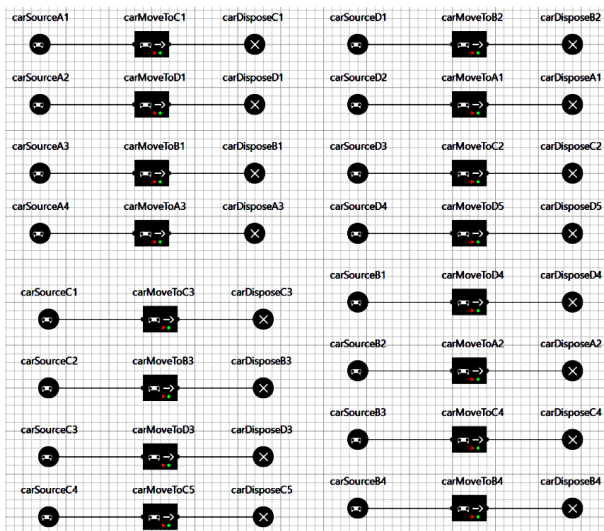


Рисунок 1.3 – Диаграмма логики движения транспорта на перекрёстке

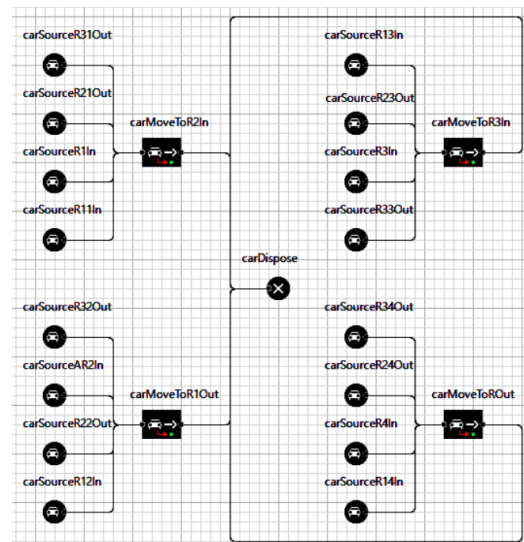


Рисунок 1.4 – Оптимизированная диаграмма логики движения транспорта на перекрёстке

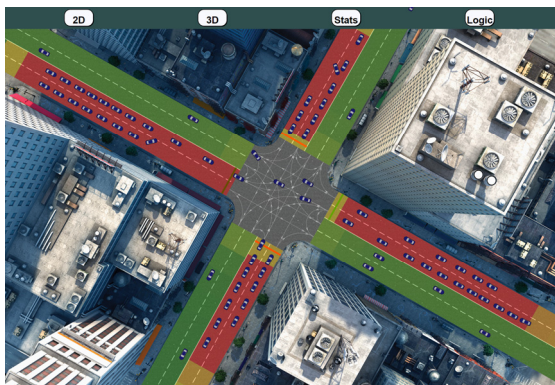


Рисунок 1.5 – Модель перекрёстка в процессе имитации (2D)

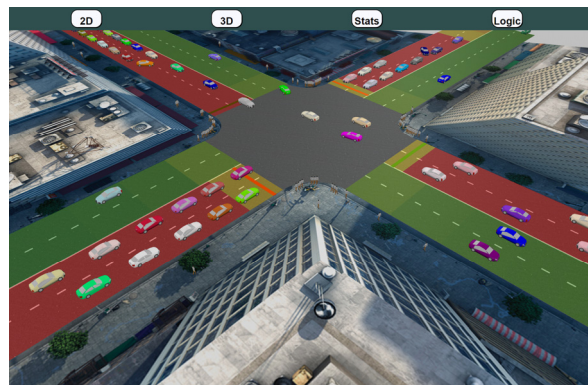


Рисунок 1.6 – Модель перекрёстка в процессе имитации (3D)

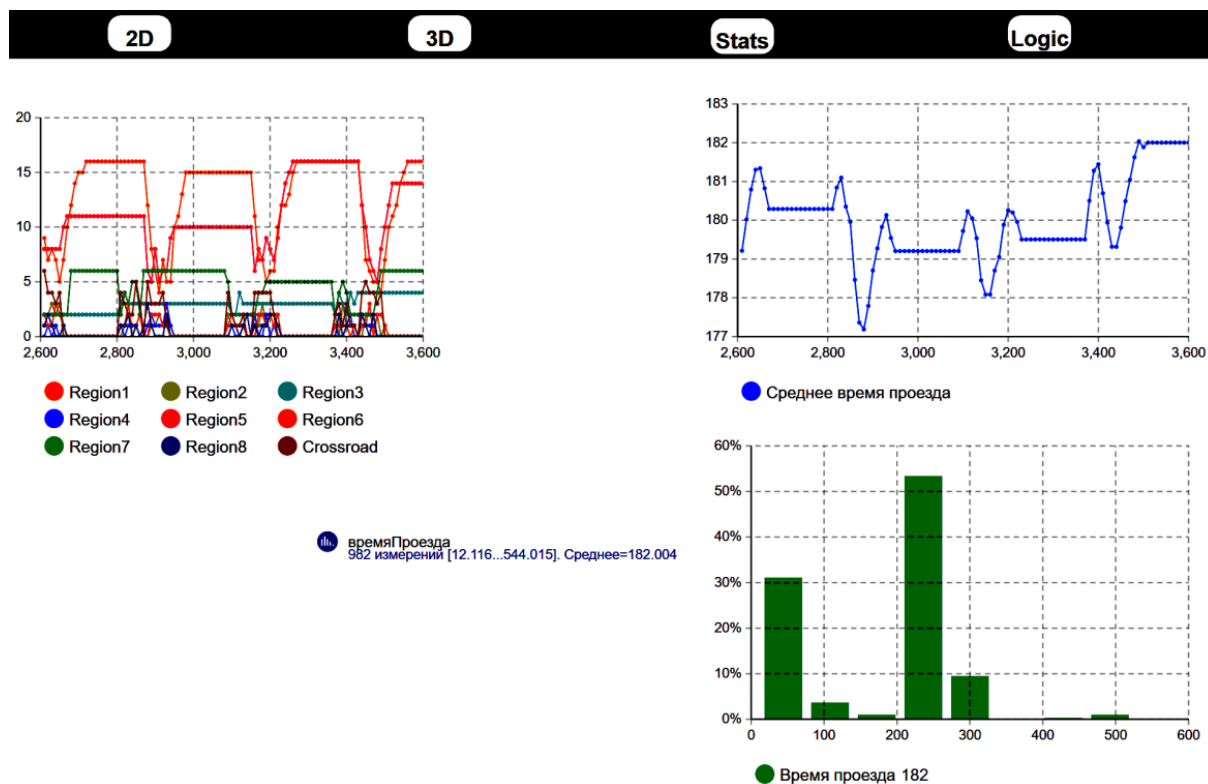


Рисунок 1.7 – Результаты моделирования дорожной ситуации с использованием модели «Перекрёсток» и логики дорожного движения, изображённой на рисунке 1.3

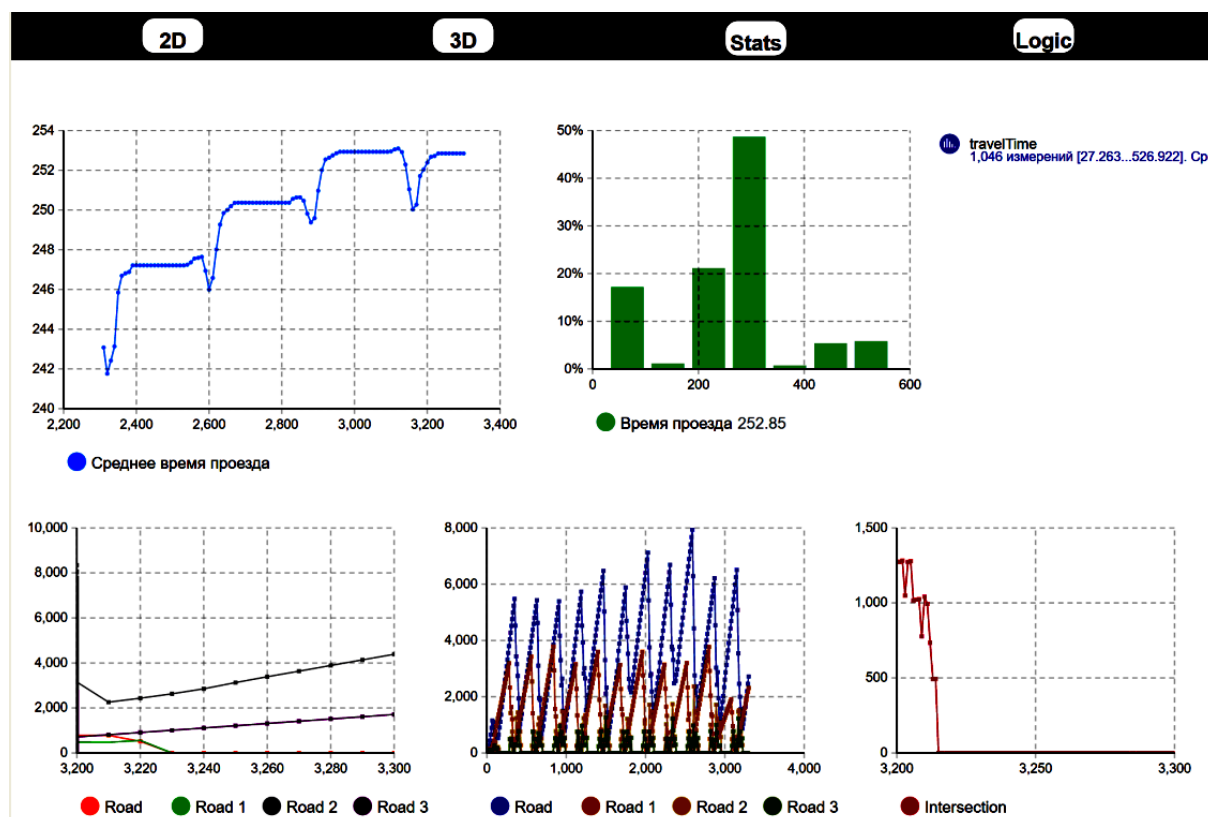


Рисунок 1.8 – Результаты моделирования дорожной ситуации с использованием модели «Перекрёсток» и логики дорожного движения, изображённой на рисунке 1.4

Благодаря управляющим элементам из секции «3D» библиотеки «Презентация» была установлена камера и создана трёхмерная анимация, отражающая процесс перемещения разных транспортных единиц (автомобилей, грузовиков, фур, автобусов и др.). Также для удобства просмотра имитации на заранее обозначенных областях перекрёстка была реализована панель навигации, позволяющая переключаться между режимами отображения имитации.

После запуска имитации (рисунки 1.3, 1.4) и проведения её в течение одного часа были сформированы результаты моделирования (рисунки 1.7 и 1.8).

На верхнем левом графике рисунка 1.7 отображено число машин (ось Y) на различных участках дороги в текущий момент времени моделирования в секундах (ось X). На графике «Среднее время проезда» отображено среднее время проезда машин на всей дороге (ось Y) в определённые моменты времени моделирования в секундах (ось X). Ниже представлена гистограмма, представляющая функцию плотности распределения времени перемещения транспортных единиц (ось X).

На левом верхнем графике рисунка 1.8 представлено среднее время проезда всех машин на дороге (ось Y), находящихся в моделируемом перекрестке в определённый момент времени (в секундах) симуляции (ось X). Справа представлена гистограмма «Время проезда» представляющая функцию плотности распределения времени перемещения транспортных единиц (ось X). На нижних графиках (слева направо) показано время в секундах (ось Y), которое провели в сумме все транспортные единицы, движущиеся в системе (от перекрёстка, к перекрёстку и на перекрёстке, соответственно) в определённый момент времени моделирования в секундах (ось X).

2 Создание интеллектуальной системы «Перекресток»

Для организации интеллектуального управления моделированием в AnyLogic был создан эксперимент «Обучение ИИ», в котором были заданы свойства и параметры, используемые для обучения ИИ-агента (агента верхнего уровня) в рамках обучения с подкреплением (RL). Данный эксперимент использовался для выгрузки готовых моделей на платформы, предназначенные для работы с ИИ, с целью обучения с подкреплением.

Для подготовки модели к обучению были заполнены такие поля эксперимента, как «Наблюдение», «Действие» и «Конфигурация». В разделе «Наблюдение» были указаны значения, которые передавались ИИ-агенту в ходе обучения для дальнейшего анализа. В разделе «Действие» были заданы значения, которые ИИ-агент рассчитывает в ходе «эпизода» модели, а затем

назначает переменным или функциям внутри модели прежде, чем перейти к следующему «эпизоду». В разделе «Конфигурация» был сформирован набор значений, определяющих начальное состояние модели перед «эпизодом». Наконец, в разделе «Модельное время» было указано, сколько времени будет проходить имитация.

Для наблюдения были выбраны данные, состоящие из времени, которое агенты провели на определенных участках дороги («getCars(true)» – автомобили, движущиеся по направлению к перекрёстку, «getCars(false)» – автомобили, движущиеся от перекрёстка), фаза светофора, время фаз светофора и текущее время. Действие, которое ИИ-агент может произвести, определялось вектором из 7 целых чисел, которые определяли, что именно делать со временем определённой фазы светофора: уменьшать, увеличивать или ничего не менять. Начальное состояние модели определялось четырьмя параметрами: промежутком времени, через который нужно производить действие («time_between_actions»), и значением времени для каждой фазы светофора.

В качестве награды использовалось значение выражения, полученное в результате вычитания суммы времени перемещения транспортных потоков, полученной до выполненного действия ИИ-агента, от суммы времени, полученной после выполнения действия. При этом суммировалось время, которое транспортные единицы провели, двигаясь по направлению к светофору (на четырех участках дороги) и на перекрёстке.

Реализованная модель «Перекресток» и заданный эксперимент «Обучение ИИ» был экспортирован в Microsoft Bonsai для проведения обучения. Для того, чтобы подключить экспортированную модель в PyCharm, использовалась библиотека Alrune. Она позволила получить доступ к данным имитационной модели и провести обучение.

3 Сравнительный анализ реализованных алгоритмов машинного обучения

В области обучения с подкреплением появляется множество алгоритмов, позволяющих эффективно обучать агентов. Некоторые из них были реализованы и протестированы в игровых средах OpenAI Gym. Кратко остановимся на выводах, которые были сделаны при использовании реализованных алгоритмов.

Такие известные методы обучения, как Q-learning и Deep Q-learning, изучают функцию значения, которая показывает ожидаемую сумму вознаграждений, заданных состоянием и действием обучаемого агента.

Q-Learning – это методика обучения с подкреплением без использования моделей. Она обычно считается «самым простым» алгоритмом обучения с подкреплением. Q-Learning использует

ранее изученные «состояния», которые были исследованы для рассмотрения будущих ходов, и сохраняет эту информацию в «Q-таблице». Для каждого действия, предпринятого из состояния, Q-table должна включать положительное или отрицательное вознаграждение. Эта форма обучения отлично подходит, когда количество ходов ограничено или среда не сложная, поскольку агент запоминает прошлые ходы и с легкостью повторяет их. Однако для более сложных сред со значительно большим количеством состояний Q-table быстро заполняется, что приводит к увеличению времени обучения.

Использование Deep Q-learning предполагает наличие некоторого хранилища с определенным размером, где хранятся последние N опытов агента. При обучении используется случайная выборка определенного размера из памяти воспроизведения и применяется обновление Q-learning. После воспроизведения опыта агент выбирает и выполняет действие в соответствии с ϵ -жадной политикой.

Преимуществами данного алгоритма является то, что каждый шаг опыта потенциально используется во многих обновлениях весов нейронной сети, что позволяет повысить эффективность данных. Использование случайных выборок нарушает корреляции между выборками и, следовательно, уменьшает дисперсию в обновлениях.

Данные методы имеют много преимуществ и хорошо обучают агентов. Однако можно выделить несколько значительных проблем: они могут иметь большие колебания во время обучения; возникают трудности при большом наборе возможных действий; нужно реализовывать компромисс между разведкой и эксплуатацией.

Все эти проблемы можно решить при помощи градиентов политики. Градиент политики (PG) – это подход к RL, оптимизирующий параметризованную модель политики для ожидаемой отдачи с использованием градиентного подъема. К преимуществам градиента политики можно отнести следующее: при обучении агента просто следуют градиенту в отношении самой политики, что означает, что постоянно совершенствуется сама политика; параметры настраиваются напрямую; имеется возможность выучить стохастические политики [7]. Недостатком градиентов политики является то, что большую часть времени они сходятся на локальном максимуме, а не на глобальном оптимуме, и их обучение может занять много времени. Но и эти проблемы можно решить правильно подобрав политику.

Для обучения модели «Перекресток» использовался градиент политики Монте-Карло. При обучении выполнялись следующие действия: вычислялась логарифмическая вероятность, полученная с помощью функции политики; полученное значение умножалось на функцию оценки; выполнялось обновление веса. Было

обнаружено, что проблема данной политики заключается в усреднении всех действий. Даже если некоторые из них были очень плохими, а балл в итоге получался высоким, данные действия оценивались как хорошие. Из этого следует, что для получения правильной политики нужно произвести много экспериментов. А это приведёт к медленному обучению.

4 Результаты обучения среды «Перекресток»

С использованием AnyLogic Cloud был проведен сравнительный анализ полученных результатов моделирования среды до и после обучения. Для этого были заданы входные и выходные данные в «Конфигурации запуска» модели. Затем модель была экспортирована в облако и создано два эксперимента. В первом эксперименте в качестве входных данных были введены начальные значения, а во втором – результаты, полученные после обучения модели (рисунок 4.1).

После проведения экспериментов с помощью режима сравнения были сопоставлены полученные результаты, которые представлены на рисунках 4.2, 4.3. Из них хорошо видно, что на исследуемом участке сети после обучения среднее время проезда транспортных единиц, как и время нахождения на перекрестке, уменьшилось, то есть пропускная способность перекрестка увеличилась.

Входные данные	
Phase 1	60 67
Phase 2	60 77
Phase 3	120 14
Intensity of arrival of ...	10000
Intensity of arrival of ...	4363454
Intensity of arrival of ...	11111
Intensity of arrival of ...	904876

Рисунок 4.1 – Входные данные для двух экспериментов

Среднее время проезда транспорта уменьшилось с 219,744 секунд до 137,718 секунд. Максимальное время перемещения транспортных единиц было сокращено с 526,922 секунд до 339,384 секунд.

Полученные результаты свидетельствуют об эффективности обучения с использованием метода градиента политики Монте-Карло. Алгоритм стабилен и обладает хорошими свойствами сходимости, однако наблюдается чувствительность к локальным минимумам.

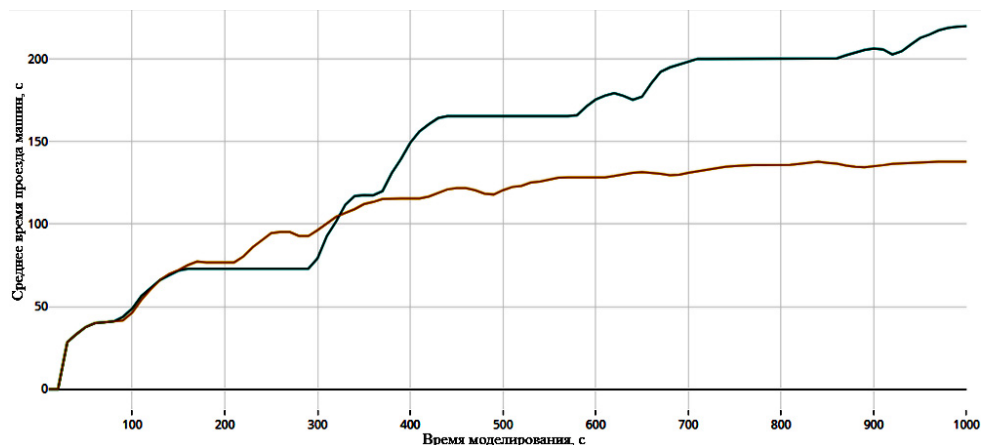


Рисунок 4.2 – Среднее время перемещения транспортных единиц

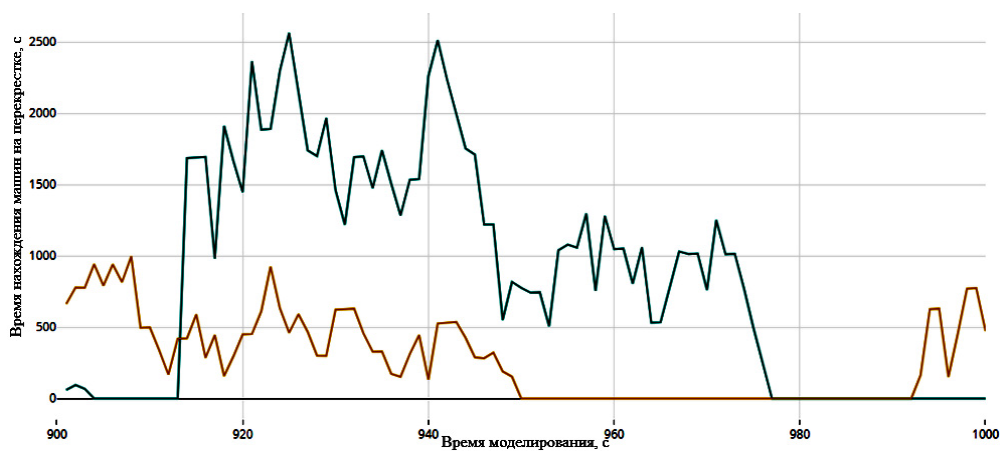


Рисунок 4.3 – Время, которое провели машины на перекрестке

Заключение

Реализованная интеллектуальная система управления перекрестком автомобильных дорог параметризована и при ее небольшой адаптации к реальному объекту моделирования может быть использована для организации эффективного управления на перекрестках, на которых на одном уровне пересекаются несколько потоков транспорта и пешеходов. Это обеспечит оперативность в организации обслуживания транспортных потоков, повысит безопасность перемещения пешеходов и позволит оптимизировать работу транспортной системы в целом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сукач, Е.И. Применение имитационных моделей для принятия решений в системах управления на транспорте / Е.И. Сукач, В.Н. Галушко, П.В. Гируц // Математические машины и системы. – 2010. – № 1. – С. 185–192.
- 2 Сукач, Е.И. Метод перераспределения автомобильных транспортных потоков региона на основе имитационного моделирования / Е.И. Сукач // Реєстрація, зберігання і обробка даних (Data Recording, Storage & Processing). – 2008. – Т. 10, № 3. – С. 37–45.
- 3 Карпов, Ю.Г. Имитационное моделирование систем. Введение в моделирование с

AnyLogic 5 / Ю.Г. Карпов. – СПб.: БХВ-Петербург, 2009. – 390 с.

4. Саттон, Ричард С. Обучение с подкреплением: введение. 2-е изд. / Ричард С. Саттон, Эндрю Дж. Барто; пер. с англ. А.А. Слинкина. – Москва: ДМК Пресс, 2020. – 552 с.

5. Судхарсан, Равичандиран. Глубокое обучение с подкреплением на Python. OpenAI Gym и TensorFlow для профи / Равичандиран Судхарсан. – СПб.: Питер, 2019. – 251 с.

6. Библиотека дорожного движения [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.anylogic.ru/>. – Дата доступа: 15.04.2023.

7. Биза, М.В. Применение градиентов политики в ходе обучения с подкреплением / М.В. Биза, Е.И. Сукач // Материалы XI республиканской научно-практической конференции «Вычислительные методы, модели и образовательные технологии», Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина, 22 октября 2022 г., Брест, 2022. – С. 124–125.

Поступила в редакцию 30.06.2023.

Информация об авторах

Сукач Елена Ивановна – к.т.н., доцент
Биза Мария Викторовна – студентка

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧАХ КЛАССИФИКАЦИИ ДАННЫХ

Е.В. Тимощенко¹, А.Ф. Ражков²

¹Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова

²Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск

RESEARCH OF THE PERFORMANCE OF MACHINE LEARNING ALGORITHMS IN DATA CLASSIFICATION PROBLEMS

E.V. Timoschenko¹, A.F. Razhkov²

¹Mogilev State A. Kuleshov University

²United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk

Аннотация. Предложен подход к решению задачи построения моделей машинного обучения в решении задач классификации данных. На примере анализа наборов биомедицинских данных проведено сравнение производительности алгоритмов машинного обучения, настроенных с помощью предварительно оптимизированных гиперпараметров. Найдены наилучшие значения гиперпараметров, обеспечивающие эффективное прогнозирование, для самых распространенных алгоритмов машинного обучения.

Ключевые слова: машинное обучение, классификация данных, оптимизация гиперпараметров, обработка больших данных, прогнозирование заболеваний.

Для цитирования: Тимощенко, Е.В. Исследование производительности алгоритмов машинного обучения в задачах классификации данных / Е.В. Тимощенко, А.Ф. Ражков // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 4 (57). – С. 94–102. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_94. – EDN: ZCJEJY

Abstract. An approach to solving the problem of constructing machine learning models in solving data classification problems is proposed. Using the example of analyzing biomedical data sets, the performance of machine learning algorithms tuned using pre-optimized hyperparameters is compared. The best values of hyperparameters that provide effective prediction were found for the most common machine learning algorithms.

Keywords: machine learning, data classification, hyperparameter optimization, big data processing, disease prediction.

For citation: Timoschenko, E.V. Research of the performance of machine learning algorithms in data classification problems / E.V. Timoschenko, A.F. Razhkov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2023. – № 4 (57). – P. 94–102. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2023_4_57_94 (in Russian). – EDN: ZCJEJY

Введение

Машинное обучение находит широкое применение в медицине и здравоохранении. Оно помогает врачам в диагностике заболеваний, прогнозировании их развития и выборе оптимального лечения [1]. Алгоритмы машинного обучения анализируют большие массивы медицинских данных – результаты анализов, жалобы пациентов, данные мониторинга и т. д. На основе этих данных строятся прогностические модели, которые затем используются для конкретных пациентов. Использование моделей машинного обучения позволяет сравнивать характеристики нового пациента с имеющимися данными и получать вероятность наличия того или иного заболевания. Такой подход позволяет диагностировать заболевания на ранних стадиях и своевременно назначать лечение. Кроме того, врачи могут опираться на рекомендации системы при выборе схемы лечения и прогнозировании его

эффективности для конкретного пациента [2]. Таким образом, машинное обучение делает медицинскую помощь более персонализированной и результативной.

Прогностические модели могут быть также полезны на этапе обучения будущих специалистов. Некоторые промежуточные результаты исследования, приведенного в данной статье (определение вероятности наличия заболевания у пациента по перечню биомедицинских данных, а также прогнозирование заболевания по симптомам пациента) нашли применение в сфере образования. Они были апробированы, положены в основу программного модуля виртуального практикума для студентов медико-биологического профиля [3] и успешно внедрены в учебный процесс МГУ имени А.А. Кулешова [4].

Построение эффективной модели машинного обучения является сложным и трудоемким процессом, который включает в себя нахождение

подходящего алгоритма обучения и получение оптимальной архитектуры модели путем настройки ее гиперпараметров [5] – параметров, которые настраиваются непосредственно перед обучением модели, а не в процессе машинного обучения.

1 Методика построения модели машинного обучения

Анализ доступных методов и схем построения модели машинного обучения [6]–[8], позволил выбрать надежную и оптимальную схему, наиболее подходящую для решения поставленной задачи (рисунок 1.1).

Реализация такой схемы проходит в несколько этапов.

1 этап. Сбор данных – это первый шаг при решении любой проблемы машинного обучения. Для данной задачи используются наборы биомедицинских данных из репозитория UCI [9], которые предназначены для обучения, проверки и

тестирования. В выбранных нами наборах данных присутствуют признаки заболеваний, а также информация о наличии заболевания.

Каждый экземпляр данных, используемый в обучении модели машинного обучения, имеет как входные, так и выходную переменные. Например, данные, которые анализируются на наличие определенного заболевания, имеют в качестве входных переменных набор признаков, описывающих это заболевание, и в качестве выходной – атрибут, указывающий, имеется ли заболевание у пациента или нет.

2 этап. Подготовка данных – самый важный шаг проекта в сфере машинного обучения, который должен проводиться до того момента, как набор данных будет использоваться для обучения модели. Использование необработанных данных при моделировании может приводить к неверным результатам.

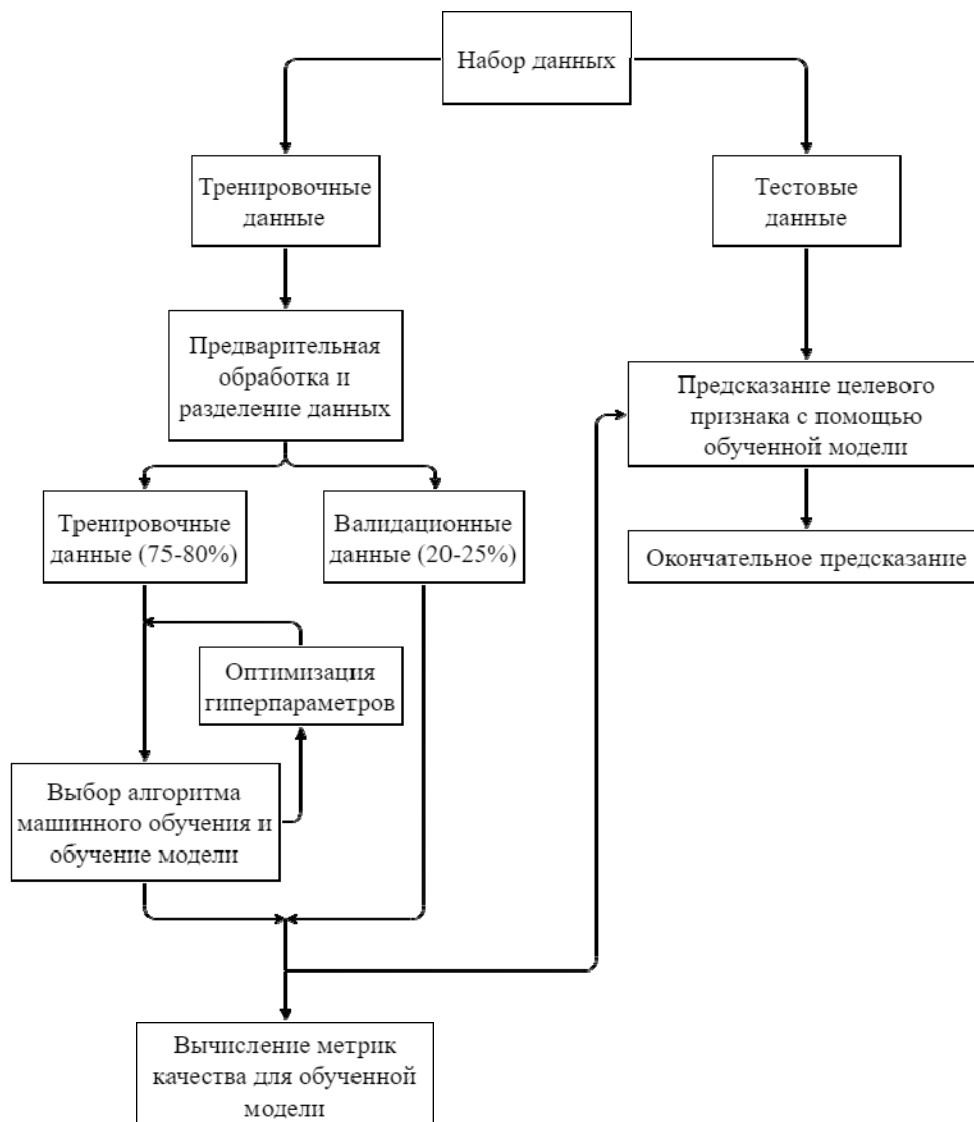


Рисунок 1.1. – Схема построения моделей машинного обучения

Таблица 1.1 – Используемые атрибуты набора данных

Атрибут	Описание	Тип, возможные значения
Age	Возраст	Число
Sex	Пол	0: женский 1: мужской
Cp	Тип болей в груди	0: бессимптомная 1: атипичная стенокардия 2: неангинальная 3: типичная стенокардия
Trestbps	Артериальное давление в состоянии покоя	Число
Chol	Общий холестерин в сыворотке крови	Число
Fbs	Уровень сахара в крови натощак	0: менее 120 мг / дл 1: более 120 мг / дл
Restecg	Результаты электрокардиографии в покое	0: норма 1: наличие аномалии ST-T 2: наличие вероятной или определенной гипертрофии левого желудочка по критериям Эстеса
Thalach	Максимальная достигнутая частота сердечных сокращений	Число
Exang	Стенокардия, вызванная физической нагрузкой	0: Нет 1: Да
Oldpeak	Депрессия ST-сегмента, вызванная упражнениями по сравнению с отдыхом	Число
Slope	Подъем пикового сегмента ST при физической нагрузке	0: косонисходящая 1: платообразная 2: косовосходящая
Ca	Количество крупных сосудов, окрашенных флуороскопией	0, 1, 2, 3
Thal	Талассемия	0: отсутствует 1: исправленный дефект 2: нормальный 3: обратимый дефект
Target	Наличие заболевания	0: отсутствие заболевания 1: наличие заболевания

3 этап. Построение модели машинного обучения: после сбора и подготовки данных они могут использоваться для обучения модели машинного обучения. Данный этап включает в себя выбор алгоритма машинного обучения и обучение модели, оптимизация гиперпараметров, вычисление метрик качества для обученной модели и ее проверка на тестовых данных.

В качестве прикладной задачи обучение моделей машинного обучения проводилось на наборах биомедицинских данных. Для примера в таблице 1.1 приведены атрибуты набора данных, которые использовались в обучении модели для прогнозной аналитики сердечно-сосудистых заболеваний.

Исследование производительности алгоритмов машинного обучения в задачах классификации данных проводилось в соответствии со схемой на рисунке 1 для решения прикладной задачи прогнозной аналитики биомедицинских данных. Для этого был проведен анализ наборов данных с использованием следующих алгоритмов машинного обучения [10], [11]–[14], [15]:

- Logistic Regression (Логистическая регрессия),
- Linear Discriminant Analysis (Линейный дискриминантный анализ),
- K-Neighbors Classifier (Метод ближайших соседей),
- Classification and Regression Tree (Метод построения деревьев решений),
- Naive Bayes Classifier (Наивный байесовский алгоритм),
- Linear Support Vector Classification (Линейный метод опорных векторов),
- C-Support Vector Classification (Метод опорных векторов),
- Multilayer Perceptron Classifier (Много-слойный перцептрон),
- Bagging Classifier (Бутстрэп-агрегирование),
- Random Forest Classifier (Случайный лес),
- Extra Trees Classifier (Классификатор экстремально рандомизированных деревьев),
- AdaBoost Classifier (адаптивный бустинг),
- Gradient Boosting Classifier (Градиентный бустинг),

- Light Gradient Boosting Machine (Градиентный бустинг деревьев решений LightGBM),
- Extreme Gradient Boosting (Градиентный бустинг деревьев решений XGBoost).

Модели машинного обучения используют 80% набора данных для обучения, а оставшиеся 20% используются для проверки точности алгоритмов. В качестве основной метрики для сравнения в данном случае используется доля правильных ответов алгоритма (*Accuracy*), определяемая следующим соотношением [16]:

$$Accuracy = (TP + TN) / (TP + FP + TN + FN),$$

где *TP* – классификатор верно утверждает, что объект принадлежит к рассматриваемому классу,

TN – классификатор верно утверждает, что объект **не** принадлежит к рассматриваемому классу,

FP – классификатор неверно утверждает, что объект принадлежит к рассматриваемому классу,

FN – классификатор неверно утверждает, что объект **не** принадлежит к рассматриваемому классу.

Для валидации точности прогнозирования были использованы наборы данных по сердечно-сосудистым заболеваниям, раку молочной железы, диабету, хронической болезни почек, заболеваниям печени [9].

2 Результаты исследования

Для наглядной демонстрации преимуществ предложенного подхода и высокой эффективности обученных моделей машинного обучения на примере анализа биомедицинских данных в таблицах 2.1–2.5 детально представлены результаты проведенного исследования производительности алгоритмов машинного обучения и их гиперпараметров для всех рассмотренных наборов данных.

Таблица 2.1 – Сердечно-сосудистые заболевания

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(BG) Bagging Classifier	84.75	bootstrap, bootstrap_features, n_estimators, n_jobs, random_state, verbose, warm_start	487.0468, True, True, 50, 1, 0, 0, False
(ET) Extra Trees Classifier	84.75	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, n_estimators, n_jobs, random_state	entropy, 10, 2, 2, 0.0, 30, 6, 0
(LR) Logistic Regression	84.74	C, class_weight, fit_intercept, intercept_scaling, l1_ratio, max_iter, multi_class, n_jobs, penalty, random_state, solver, tol	0.01, balanced, False, 0.01, 0.2, 5000, auto, 1, elasticnet, 0, saga, 1.01
(CART) Classification and Regression Tree	84.35	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, splitter	11.4143, gini, 16, 6, 2, 0.0, random
(KNN) K-Neighbors Classifier	84.35	algorithm, leaf_size, n_jobs, n_neighbors, p, weights	auto, 2, 1, 9, 1, uniform
(LSVC) Linear Support Vector Classification	84.34	C, class_weight, dual, fit_intercept, intercept_scaling, loss, max_iter, multi_class, penalty, random_state, tol, verbose	0.01, , True, True, 0.41, squared_hinge, 5000, ovr, l2, 0, 2.01, 0
(RF) Random Forest Classifier	83.91	bootstrap, criterion, max_depth, max_features, n_estimators, random_state	True, gini, 2, auto, 110, 0
(XGB) Extreme Gradient Boosting	83.91	learning_rate, max_depth, n_estimators, nthread	0.051, 1, 480, 6
(LGBM) Light Gradient Boosting Machine	83.5	boosting_type, learning_rate, max_depth, n_jobs, num_leaves, objective, random_state	dart, 0.379, -1, 6, 2, binary, 0
(NB) Naive Bayes Classifier	83.5	var_smoothing	0.3960000001
(LDA) Linear Discriminant Analysis	83.1	solver, store_covariance, tol	svd, False, 0.8
(SVC) C-Support Vector Classification	83.1	C, degree, gamma, kernel, random_state, tol, verbose	0.61, 1, scale, poly, 0, 0.201, False
(MLP) Multilayer Perceptron Classifier	82.29	activation, alpha, hidden_layer_sizes, random_state, tol, verbose, warm_start	relu, 0.4, 130, 0, 0.001, False, False

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(GB) Gradient Boosting Classifier	82.27	criterion, learning_rate, loss, max_depth, n_estimators, random_state, tol	friedman_mse, 0.1, exponential, 1, 400, 0, 0.0001
(AB) AdaBoost Classifier	82.26	algorithm, learning_rate, n_estimators, random_state	525.1748, SAMME, 0.36, 405, 0

Таблица 2.2 – Рак молочной железы

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(LR) Logistic Regression	98.68	C, class_weight, fit_intercept, intercept_scaling, l1_ratio, max_iter, multi_class, n_jobs, penalty, random_state, solver, tol	0.21, , False, 0.01, 0.2, 5000, multinomial, 1, elasticnet, 0, saga, 0.01
(LSVC) Linear Support Vector Classification	98.68	C, class_weight, dual, fit_intercept, intercept_scaling, loss, max_iter, multi_class, penalty, random_state, tol, verbose	0.21, balanced, True, True, 0.61, hinge, 5000, ovr, 12, 0, 0.51, 0
(SVC) C-Support Vector Classification	98.24	C, degree, gamma, kernel, random_state, tol, verbose	0.41, 1, scale, linear, 0, 0.001, False
(MLP) Multilayer Perceptron Classifier	98.02	activation, alpha, hidden_layer_sizes, random_state, tol, verbose, warm_start	identity, 0.0, 100, 0, 0.001, False, False
(AB) AdaBoost Classifier	97.8	algorithm, learning_rate, n_estimators, random_state	SAMME, 0.4, 400, 0
(LGBM) Light Gradient Boosting Machine	97.8	boosting_type, learning_rate, max_depth, n_jobs, num_leaves, objective, random_state	gbdt, 0.364, -1, 6, 10, binary, 0
(ET) Extra Trees Classifier	97.58	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, n_estimators, n_jobs, random_state	entropy, 12, 1, 3, 0.0, 30, 6, 0
(GB) Gradient Boosting Classifier	97.36	criterion, learning_rate, loss, max_depth, n_estimators, random_state, tol	friedman_mse, 0.4, exponential, 1, 700, 0, 0.0001
(XGB) Extreme Gradient Boosting	97.14	learning_rate, max_depth, n_estimators, nthread	0.201, 1, 520, 6
(KNN) K-Neighbors Classifier	96.92	algorithm, leaf_size, n_jobs, n_neighbors, p, weights	auto, 2, 1, 11, 1, uniform
(RF) Random Forest Classifier	96.48	bootstrap, criterion, max_depth, max_features, n_estimators, random_state	True, entropy, 22, auto, 310, 0
(BG) Bagging Classifier	96.04	bootstrap, bootstrap_features, n_estimators, n_jobs, random_state, verbose, warm_start	True, True, 40, 1, 0, 0, False
(LDA) Linear Discriminant Analysis	96.04	solver, store_covariance, tol	svd, False, 0.2
(CART) Classification and Regression Tree	94.95	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, splitter	gini, 26, 6, 2, 0.0, random
(NB) Naive Bayes Classifier	94.73	var_smoothing	1.00E-10

Таблица 2.3 – Диабет

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(CART) Classification and Regression Tree	81.17	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, splitter	entropy, 41, 11, 2, 0.0, random

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(LSVC) Linear Support Vector Classification	81.16	C, class_weight, dual, fit_intercept, intercept_scaling, loss, max_iter, multi_class, penalty, random_state, tol, verbose	0.81, , True, True, 0.41, squared_hinge, 5000, ovr, l2, 0, 4.01, 0
(SVC) C-Support Vector Classification	79.55	C, degree, gamma, kernel, random_state, tol, verbose	0.21, 1, auto, poly, 0, 0.401, False
(RF) Random Forest Classifier	79.54	bootstrap, criterion, max_depth, max_features, n_estimators, random_state	True, gini, 22, log2, 310, 0
(LDA) Linear Discriminant Analysis	79.25	solver, store_covariance, tol	svd, False, 0.0
(LGBM) Light Gradient Boosting Machine	79.24	boosting_type, learning_rate, max_depth, n_jobs, num_leaves, objective, random_state	dart, 0.368, -1, 6, 2, binary, 0
(MLP) Multilayer Perceptron Classifier	79.24	activation, alpha, hidden_layer_sizes, random_state, tol, verbose, warm_start	identity, 0.6, 100, 0, 0.001, False, False
(ET) Extra Trees Classifier	79.23	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, n_estimators, n_jobs, random_state	gini, 16, 1, 3, 0.0, 40, 6, 0
(GB) Gradient Boosting Classifier	78.91	criterion, learning_rate, loss, max_depth, n_estimators, random_state, tol	friedman_mse, 0.4, deviance, 4, 100, 0, 0.0001
(LR) Logistic Regression	78.91	C, class_weight, fit_intercept, intercept_scaling, l1_ratio, max_iter, multi_class, n_jobs, penalty, random_state, solver, tol	0.21, , True, 0.01, 0.6, 5000, auto, 1, elasticnet, 0, saga, 1.01
(AB) AdaBoost Classifier	78.59	algorithm, learning_rate, n_estimators, random_state	SAMME, 0.38, 455, 0
(BG) Bagging Classifier	78.26	bootstrap, bootstrap_features, n_estimators, n_jobs, random_state, verbose, warm_start	True, False, 25, 1, 0, 0, False
(KNN) K-Neighbors Classifier	77.96	algorithm, leaf_size, n_jobs, n_neighbors, p, weights	auto, 2, 1, 29, 1, uniform
(NB) Naive Bayes Classifier	77.32	var_smoothing	0.2846000001
(XGB) Extreme Gradient Boosting	77.3	learning_rate, max_depth, n_estimators, nthread	0.051, 1, 440, 6

Таблица 2.4 – Хроническая болезнь почек

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(AB) AdaBoost Classifier	100.0	algorithm, learning_rate, n_estimators, random_state	SAMME, 0.35, 400, 0
(CART) Classification and Regression Tree	100.0	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, splitter	gini, 1, 11, 2, 0.1, best
(ET) Extra Trees Classifier	100.0	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, n_estimators, n_jobs, random_state	gini, 10, 1, 2, 0.0, 20, 6, 0
(LGBM) Light Gradient Boosting Machine	100.0	boosting_type, learning_rate, max_depth, n_jobs, num_leaves, objective, random_state	gbdt, 0.35, -1, 6, 2, binary, 0

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(LR) Logistic Regression	100.0	C, class_weight, fit_intercept, intercept_scaling, l1_ratio, max_iter, multi_class, n_jobs, penalty, random_state, solver, tol	0.01, , False, 0.01, 0.1, 5000, auto, 1, elasticnet, 0, saga, 0.01
(LSVC) Linear Support Vector Classification	100.0	C, class_weight, dual, fit_intercept, intercept_scaling, loss, max_iter, multi_class, penalty, random_state, tol, verbose	0.01, , False, True, 0.01, squared_hinge, 5000, ovr, l1, 0, 0.01, 0
(MLP) Multilayer Perceptron Classifier	100.0	activation, alpha, hidden_layer_sizes, random_state, tol, verbose, warm_start	identity, 0.0, 110, 0, 0.001, False, False
(NB) Naive Bayes Classifier	100.0	var_smoothing	1, 00E-10
(RF) Random Forest Classifier	100.0	bootstrap, criterion, max_depth, max_features, n_estimators, random_state	False, gini, 22, auto, 210, 0
(SVC) C-Support Vector Classification	100.0	C, degree, gamma, kernel, random_state, tol, verbose	0.21, 1, scale, linear, 0, 0.101, False
(XGB) Extreme Gradient Boosting	100.0	learning_rate, max_depth, n_estimators, nthread	0.001, 1, 400, 6
(KNN) K-Neighbors Classifier	97.6	algorithm, leaf_size, n_jobs, n_neighbors, p, weights	auto, 2, 1, 2, 1, distance
(BG) Bagging Classifier	98.4	bootstrap, bootstrap_features, n_estimators, n_jobs, random_state, verbose, warm_start	True, False, 35, 1, 0, 0, False
(GB) Gradient Boosting Classifier	98.4	criterion, learning_rate, loss, max_depth, n_estimators, random_state, tol	friedman_mse, 0.1, deviance, 1, 400, 0, 0.0001
(LDA) Linear Discriminant Analysis	99.2	solver, store_covariance, tol	svd, False, 0.4

Таблица 2.5 – Заболевания печени

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(LSVC) Linear Support Vector Classification	73.23	C, class_weight, dual, fit_intercept, intercept_scaling, loss, max_iter, multi_class, penalty, random_state, tol, verbose	0.81, , True, True, 0.61, squared_hinge, 5000, ovr, l2, 0, 2.51, 0
(ET) Extra Trees Classifier	73.01	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, n_estimators, n_jobs, random_state	gini, 16, 1, 3, 0.0, 60, 6, 0
(LR) Logistic Regression	72.79	C, class_weight, fit_intercept, intercept_scaling, l1_ratio, max_iter, multi_class, n_jobs, penalty, random_state, solver, tol	0.81, , True, 0.01, 0.1, 5000, multinomial, 1, elasticnet, 0, saga, 0.01
(CART) Classification and Regression Tree	72.56	criterion, max_depth, min_samples_leaf, min_samples_split, min_weight_fraction_leaf, splitter	gini, 16, 16, 7, 0.0, random
(KNN) K-Neighbors Classifier	72.34	algorithm, leaf_size, n_jobs, n_neighbors, p, weights	auto, 2, 1, 27, 2, uniform
(MLP) Multilayer Perceptron Classifier	72.13	activation, alpha, hidden_layer_sizes, random_state, tol, verbose, warm_start	tanh, 0.4, 110, 0, 0.001, False, False

Алгоритм	Точность (%)	Параметры	Значения параметров
(LGBM) Light Gradient Boosting Machine	72.12	boosting_type, learning_rate, max_depth, n_jobs, num_leaves, objective, random_state	gbdt, 0.372, -1, 6, 9, binary, 0
(LDA) Linear Discriminant Analysis	71.68	solver, store_covariance, tol	svd, False, 0.1
(RF) Random Forest Classifier	71.46	bootstrap, criterion, max_depth, max_features, n_estimators, random_state	True, entropy, 2, auto, 10, 0
(SVC) C-Support Vector Classification	71.46	C, degree, gamma, kernel, random_state, tol, verbose	0.01, 1, scale, linear, 0, 0.001, False
(XGB) Extreme Gradient Boosting	71.46	learning_rate, max_depth, n_estimators, nthread	0.001, 0, 400, 6
(GB) Gradient Boosting Classifier	71.24	criterion, learning_rate, loss, max_depth, n_estimators, random_state, tol	friedman_mse, 0.1, exponential, 1, 100, 0, 0.0001
(AB) AdaBoost Classifier	70.12	algorithm, learning_rate, n_estimators, random_state	SAMME, 0.45, 470, 0
(BG) Bagging Classifier	68.58	bootstrap, bootstrap_features, n_estimators, n_jobs, random_state, verbose, warm_start	True, True, 95, 1, 0, 0, False
(NB) Naive Bayes Classifier	58.84	var_smoothing	1.00E-10

Анализ полученных результатов, проведенный для каждого набора данных, позволил определить наиболее эффективный алгоритм машинного обучения, обладающий наиболее высокой точностью.

Заключение

Предложен подход, основанный на использовании оптимизированных алгоритмов машинного обучения, который позволяет обеспечить эффективное прогнозирование заболеваний на этапе ранней диагностики. Проведен анализ производительности алгоритмов машинного обучения для классификации биомедицинских данных. Исследована эффективность наиболее популярных алгоритмов классификации данных. Для каждого алгоритма определены оптимальные значения гиперпараметров для наборов данных по сердечно-сосудистым заболеваниям, раку молочной железы, диабету, хронической болезни почек, заболеваниям печени.

Найдены алгоритмы машинного обучения, обладающие наивысшей производительностью: для сердечно-сосудистых заболеваний – Extra Trees Classifier – с точностью 84.80%, для рака молочной железы – Logistic Regression – с точностью 98.68%, для диабета – Classification and Regression Tree – с точностью 81.17%, для хронической болезни почек – AdaBoost Classifier – с точностью 100.0%, для заболеваний печени – Linear Support Vector Classification – с точностью 73.23%.

Полученные результаты могут быть использованы в здравоохранении для разработки систем поддержки принятия врачебных решений.

В перспективе с целью повышения точности и надежности результатов прогнозирования планируется проведение исследований в направлении разработки нейросетевых моделей на основе современных архитектур глубокого обучения, объединяющие в себе различные типы слоев.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Rajkomar, A.* Machine Learning in Medicine / A. Rajkomar, J. Dean, I. Kohane // The New England journal of medicine. – 2019. – Apr 4. – № 380 (14). – P. 1347–1358. – DOI: 10.1056/NEJMr1814259.
2. *Almarabeh, H.* A study of data mining techniques accuracy for healthcare / H. Almarabeh, E. Amer // International Journal of Computer Applications. – Jun 2017. – Vol. 168, № 3. – P. 12–17.
3. *Тимощенко, Е.В.* Методы интеллектуального анализа данных в виртуальном практикуме для целей цифровизации образования / Е.В. Тимощенко, А.Ф. Ражков // Цифровая трансформация. – 2021. – № 4. – С. 52–62.
4. *Тимощенко, Е.В.* Интеллектуальный анализ данных: лабораторный практикум / Е.В. Тимощенко, А.Ф. Ражков. – Могилев: МГУ имени А.А. Кулешова, 2022. – 72 с.
5. *Ражков, А.Ф.* Оптимизация гиперпараметров алгоритмов машинного обучения для решения задач классификации данных / А.Ф. Ражков, Е.В. Тимощенко // Современное программирование:

материалы IV Международной научно-практической конференции (г. Нижневартовск, 8 декабря 2021 года) / отв. ред. Т.Б. Казиахмедов. – Нижневартовск: Нижневартовский государственный университет, 2022. – С. 267–274.

6. Скобцов, В.Ю. Нейросетевые модели для бинарной классификации данных телеметрической информации малых космических аппаратов / Скобцов В. Ю. // Информационные технологии и системы 2021 (ИТС 2021): материалы международной научной конференции, Минск, 24 ноября 2021 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники; редкол.: Л.Ю. Шилин [и др.]. – Минск, 2021. – С. 98–100.

7. *A data-driven approach for multi-scale GIS-based building energy modeling for analysis, planning and support decision making* / Ali, Usman & Shamsi, Mohammad Haris & Bohacek, Mark & Purcell, Karl & Hoare, Cathal & Mangina, Eleni & O Donnell, James // *Applied Energy*. – 2020. – DOI: 279.10.1016/j.apenergy.2020.115834.

8. Sen, P.C. Supervised Classification Algorithms in Machine Learning: A Survey and Review / P.C. Sen, M. Hajra, M. Ghosh // *In Emerging Technology in Modelling and Graphics; Advances in Intelligent Systems and Computing* 937. – Springer Nature: Singapore, 2020. – P. 99–111.

9. *UCI Machine Learning Repository* [Electronic resource]. – Mode of access: <https://archive.ics.uci.edu/>. – Date of access: 20.09.2023.

10. Тимощенко, Е.В. Методы интеллектуального анализа биомедицинских данных / Е.В. Тимощенко, А.Ф. Ражков // *Итоги научных исследований учёных МГУ им. А.А. Кулешова 2019 г.:* материалы научно-методической конференции (г. Могилев, 29 января – 10 февраля. 2020 года). – Могилев, 2020. – С. 106–107.

11. Balasree, K. Big Data on Machine Learning – A Review / K. Balasree, K. Dharmarajan // *Engineering and Scientific International Journal*. – 2021. – № 8(3). – P. 86–91.

12. Bardab, S.N. Data mining classification algorithms: An overview / S.N. Bardab, T.M. Ahmed, T.A.A. Mohammed // *International Journal of Advanced and Applied Sciences*. – 2021. – № 8 (2). – P. 1–5.

13. Fatima, M. Survey of machine learning algorithms for disease diagnostic / M. Fatima, M. Pasha // *Journal of Intelligent Learning Systems and Applications*. – 2017. – Vol. 9, № 1. – P. 1–16.

14. Faouzi, Johann. Classic machine learning algorithms / Johann Faouzi, Olivier Colliot // *Machine Learning for Brain Disorders. Neuromethods*. – 2023. – Vol. 197. – DOI: 10.1007/978-1-0716-3195-9_2.

15. Raschka, S. Machine Learning in Python: Main Developments and Technology Trends in Data Science, Machine Learning, and Artificial Intelligence / S. Raschka, J. Patterson, C. Nolet // *Information*. – 2020. – Vol. 11, № 4. – P. 193. – DOI: 10.3390/info11040193.

16. Erickson, B.J. Magician's Corner: 9 / B.J. Erickson, F. Kitamura // *Performance Metrics for Machine Learning Models. Radiology. Artificial Intelligence*. – 2021. – № 3 (3). – DOI: 10.1148/ryai.2021200126.

Поступила в редакцию 29.09.2023.

Информация об авторах

Тимощенко Елена Валерьевна – к.ф.-м.н., доцент
Ражков Александр Федорович – аспирант

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).