ISSN 2077-8708

Проблемы физики, математики и техники

№1 (58) 2024

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

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»

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

№ 1 (58) 2024

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Андрусевич П.П., Редьков В.А. Диракоподобные уравнения и обобщенные майорановские поля, внутренняя симметрия 7

Гиргель С.С. ТМ моды векторных декартовых пучков Куммера конечной мощности 16

Можаровский В.В., Кукареко В.А., Марьин С.А., Кушнеров А.В. Численный расчет и анализ напряженного состояния в слоистом теле при трении с учетом изменения модулей упругости покрытия и основания 22

Никитюк Ю.В., Емельянов В.А., Шершнев Е.Б., Ма Ц., Ван Л., Аушев И.Ю. Оптимизация параметров двулучевого лазерного раскалывания стеклоизделий трубчатой формы 29

Пилипцов Д.Г., Руденков А.С., Рогачёв А.В., Джоу Бин, Кулеш Е.А., Федосенко Н.Н. Структура и механические свойства a-C покрытий, осажденных из импульсной углеродной плазмы на нагретый подслой Ni 36

Свистун А.Ч., Мусафиров Э.В., Гайда Л.С., Матук Е.В. Перемещение и локализация наночастиц в идеальной жидкости под действием градиентной силы светового давления 44

Ярмоленко М.А., Цзян Сяо Хун, Рогачёв А.А., Рогачёв А.В., Руденков А.С., Ярмоленко О.А., Фролов С.А. Молекулярная структура и антифунгицидные свойства покрытий на основе клотримазола и полимеров, сформированных из активной газовой фазы 50

Ярмолич М.В., Каланда Н.А., Петров А.В., Лазарук С.К., Семченко А.В., Сангаа Д., Мунхцэцэг С. Степень фазовых превращений в условиях политермического синтеза стронций-замещенного ферромолибдата 57

МАТЕМАТИКА

Бычков П.В., Каморников С.Ф., Тютянов В.Н. Конечные группы с наследственно *G*-перестановочными подгруппами малого порядка 63

Старовойтов А.П., Рябченко Н.В. Рациональные аппроксимации рядов Лорана 68

ТЕХНИКА

Комнатный Д.В. Расчет электростатического поля ограничителей перенапряжения методом теорем сложения 74

Чан Ван Чиеу, Дао Динь Ха, Новиков П.Э., Корсак К.В., Ловшенко И.Ю., Стемпицкий В.Р. Интегральная схема считывания данных с неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа 79

ИНФОРМАТИКА

Демиденко О.М., Якимов А.И., Борчик Е.М., Якимов Е.А., Денисевич Д.А. Решение задачи управления порядком выполнения заказов промышленного предприятия 86

Смородин В.С., Прохоренко В.А. Интеллектуальная система адаптации управления с обратными связями 93

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 редакции приказа Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь от 2 февраля 2011 г. № 26), решение 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 Академии 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 15.03.24. Формат 60×84 $\frac{1}{8}$. Бумага офсетная. Гарнитура Times.
Усл. печ. л. 11,86. Уч.-изд. л. 10,33. Тираж 18 экз. Заказ № 175.

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

PROBLEMS OF PHYSICS, MATHEMATICS AND TECHNICS

SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL

Published since December 2009

Released quarterly

№ 1 (58) 2024

CONTENTS

PHYSICS

Andrusevich P.P., Red'kov V.A. Dirac like equations and generalized Majorana fields, intrinsic symmetries 7

Girgel S.S. TM modes of vector cartesian Kummer beams with transferable limited power 16

Mozharovsky V.V., Kukareko V.A., Marjin S.A., Kushnerou A.V. Numerical calculation and analysis of the stress state in a layered body during friction, taken into account the changes in the elastic modules of the coating and base 22

Nikityuk Yu.V., Emelyanov V.A., Shershnev E.B., Ma J., Wang L., Aushev I.Yu. Optimization of parameters for double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products 29

Piliptsou D.G., Rudenkov A.S., Rogachev A.V., Zhou Bin, Kulesh E.A., Fedosenko N.N. Structure and mechanical properties of a-C coatings deposited from pulse carbon plasma on a Ni heated sublayer 36

Svistun A.Ch., Musafirov E.V., Gaida L.S., Matuk E.V. Movement and localization of nanoparticles in an ideal liquid under the influence of the gradient force of light pressure 44

Yarmolenko M.A., Jiang Xiao Homg, Rogachev A.A., Rogachev A.V., Rudenkov A.S., Yarmolenko V.A., Frolov S.A. Molecular structure and anti-fungicidal properties of coatings based on clotrimazole and polymers formed from the active gas phase 50

Yarmolich M.V., Kalanda N.A., Petrov A.V., Lazarouk S.K., Semchenko A.V., Sangaa D., Munkhtsetseg S. Degree of phase transformations under conditions of polythermal synthesis of strontium-substituted ferromolybdate 57

MATHEMATICS

Bychkov P.V., Kamornikov S.F., Tyutyanov V.N. Finite groups with hereditarily *G*-permutable subgroups of small order 63

Starovoitov A.P., Ryabchenko N.V. Rational approximations of Laurent series 68

TECHNICS

Komnatny D.V. Electrostatic field of overvoltage limiter calculation by addition theorems method 74

Tran Van Trieu, Dao Dinh Ha, Novikov P.E., Korsak K.V., Lovshenko I.Yu., Stempitsky V.R. Readout integrated circuit of thermal uncooled bolometric type detectors 79

INFORMATION SCIENCE

Demidenko O.M., Yakimov A.I., Borchik E.M., Yakimov E.A., Denisevich D.A. Solving the problem of order fulfillment management of an industrial enterprise 86

Smorodin V.S., Prokhorenko V.A. Intellectual adaptive control system with feedback connections 93

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 539.12 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_7
EDN: TZLPQY

ДИРАКОПОДОБНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ОБОБЩЕННЫЕ МАЙОРАНОВСКИЕ ПОЛЯ, ВНУТРЕННЯЯ СИММЕТРИЯ

П.П. Андрусевич[1], **В.А. Редьков**[2]

[1]*Брестский государственный колледж связи*
[2]*Институт физики имени Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси*

DIRAC LIKE EQUATIONS AND GENERALIZED MAJORANA FIELDS, INTRINSIC SYMMETRIES

P.P. Andrusevich[1], **V.A. Red'kov**[2]

[1]*Brest State College of Communication*
[2]*B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus*

Аннотация. Для многокомпонентного матричного уравнения $(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0$ вводится понятие внутренней симметрии. Эти симметрии должны сохранять форму уравнения и соответствующий лагранжиан должен быть инвариантен относительно преобразования симметрии. Накладывается дополнительное требование: преобразования симметрии должны сохранять майорановскую природу полей. Это означает, что если функция Ψ_A является действительной (мнимой) частью волновой функции, то после преобразования функция остается действительной (мнимой). Исследованы многокомпонентные поля Майораны, которые могут быть связаны с одним, двумя, тремя и четырьмя полями Дирака, как массивными, так и безмассовыми. Установлены группы преобразований симметрии для этих полей.

Ключевые слова: *обобщенные дираковские и майорановские поля*, *лагранжев формализм*, *внутренняя симметрия.*

Для цитирования: *Андрусевич*, *П.П.* Диракоподобные уравнения и обобщенные майорановские поля, внутренняя симметрия / П.П. Андрусевич, В.А. Редьков // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 7–15. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_7. – EDN: TZLPQY

Abstract. We start with the the multicomponent matrix equation $(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0$, and introduce the concept of the intrinsic symmetry. These symmetries should preserve the form of the basic equation. The relevant Lagrangian should be invariant under the intrinsic symmetry transformation. We will impose one additional requirement on symmetry transformations: such transformations should preserve the Majorana nature of the fields. This means that if the function Ψ_A is real (imaginary) part of the wave function, then after symmetry transformation the function remains real (imaginary). The situation for massless field $\Gamma_\mu \partial_\mu \psi = 0$ is substantially different. The Lagrangian invariance with respect to intrinsic symmetry transformation for massless case coincide with that for massive case. The main accent will be done on multicomponent Majorana fields, which can be related to one, two, three and four Dirac fields.

Keywords: *generalized Dirac and Majorana fields*, *Lagrangian formalism*, *intrinsic symmetry.*

For citation: *Andrusevich*, *P.P.* Dirac like equations and generalized majorana fields, intrinsic symmetries / P.P. Andrusevich, V.A. Red'kov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 7–15. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_7 (in Russian). – EDN: TZLPQY

Introduction

The theory of relativistic wave equations is the base for description of the elementary particles and their interaction. It started with the investigations of P.A.M. Dirac [1], W. Pauli [2], and M. Fierz [3]. These studies were proceeded by H.J. Bhabha [4] and Harish – Chandra [5]. They proposed for description of particles to apply the first order equations in matrix form

$$(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\Psi = 0, \qquad (0.1)$$

where Ψ stands for wave functions, Γ_μ designates square matrices, m is the mass parameter.

In this field, the investigation by I.M. Gelfand and A.M. Yaglom [6] in which the general method for constructing the wave equations in matrix form (0.1) for particles with any sets of spin and mass states was developed was very important. Substantial contribution in this theory was done by F.I. Fedorov et. all [7], [8]. Important contribution in studying the algebras of the matrices Γ_μ and development of the methods of calculation was done by L.A. Shelepin [9]. Also significant contribution was done by V.I. Fuschich and A.G. Nikitin [10], [11]. They proved existence of invariance for many physical equations on the base of non Lie-like symmetries.

There exists a special way for describing the intrinsic degrees of freedom and additional characteristics of the particles, it is based on the use of extended sets of representations of the Lorentz group. The known example is the Dirac-Kähler system referring to the particle with two spin states $(s = 0,1)$ and degeneration in intrinsic parities. Firstly, the Dirac-Käahler equation was formulated in tensor form by C.G. Darwin [12]. For describing the electron in external Coulomb field he proposed to apply the complicated tensor system of equations. In this way, he derived the energy spectrum in presence of external Coulomb field which coincides with that in the Dirac theory. Later on, this Darwin equation was rediscovered by many researchers. The mostly known is the paper by E. Kähler [13], where the formalism of differential forms was used. In the papers of V.I. Strazhev with coauthors [14], [19], this system was studied in detail within the conventional theory of relativistic wave equations.

Intrinsic symmetries for massless Dirac equation were considered many years ago by W. Pauli [20] and F. Gursey [21]. The main goal of the present paper is to generalize their approach to the cases of 2, 3, 4 Dirac fields, both massive and massless, the accent will be given to the case of Majorana particles related to 1, 2, 3, 4 bispinor fields.

1 Basic Definitions

Let us start with the matrix equation and corresponding Lagrangian

$$(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0, \quad L = -\psi^+ \eta (\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi. \quad (1.1)$$

Under the intrinsic symmetry transformations we mean linear transformations $\Psi'_A = Q_{AB}\Psi_B$ which obey a number of conditions. They should preserve the form of equation (1.1), this leads to

$$(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)Q\psi = 0 \Rightarrow (\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi' = 0, \quad [Q, \Gamma_\mu]_- = 0. \quad (1.2)$$

Lagrangian (1.1) should be invariant under the transformation Q, this requirement provides us with the following restriction

$$Q^+ \eta Q = \eta. \quad (1.3)$$

We will impose one additional requirement on symmetry transformations. Such transformations should preserve the Majorana nature of the field. This means that if the function Ψ_A is real (imaginary) part of the complete wave function, then after symmetry transformation the function $\Psi'_A = Q_{AB}\Psi_B$ remains real (imaginary). Henceforth, this requirement is called the Majorana condition. Now let us specify the massless case

$$\Gamma_\mu \partial_\mu \psi = 0. \quad (1.4)$$

The requirement of invariance for that equation leads to two alternative restrictions

$$\Gamma_\mu \partial_\mu Q_1 \psi = 0 \Rightarrow [Q_1, \Gamma_\mu]_- = 0, \quad -\Gamma_\mu \partial_\mu Q_2 \psi = 0 \Rightarrow [Q_2, \Gamma_\mu]_+ = 0. \quad (1.5)$$

Additional requirement of Lagrangian invariance also leads to two possibilities. One is $L' = L, \left[Q_1, \Gamma_\mu\right]_- = 0;$ it reduces to yet known constraint (1.3), which arose in the massive case. The other possibility is as follows

$$L' = -L, \left[Q_2, \Gamma_\mu\right]_+ = 0;$$

whence we obtain $Q_2^+ \eta \Gamma_\mu Q_2 = -\eta \Gamma_\mu$. Keeping in mind the relation $\left[Q_2, \Gamma_\mu\right]_+ = 0,$ we conclude that the last relation is equivalent to the known restriction (1.3). Thus, the Lagrangian invariance with respect to intrinsic symmetry transformation both for massive and massless cases assumes one and the same constraint (1.3).

For infinitesimal one-parametric intrinsic symmetry transformation $Q = 1 + \omega J$, relation (1.3) takes on the simple form

$$(\omega J)^+ \eta = -\eta\, \omega J. \quad (1.6)$$

2 One Dirac Field

Let us consider one Dirac equation for a particle with nonzero mass $(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0$, where ψ transforms as a bispinor; we used the metric with imaginary unit, $x_\mu = (\vec{x}, ict)$. Below we will apply Majorana representation to the Dirac matrices [22]:

$$\gamma_1 = \sigma_1 \otimes \sigma_1, \gamma_2 = \sigma_3 \otimes I_2, \quad \gamma_3 = \sigma_1 \otimes \sigma_3, \gamma_4 = \sigma_1 \otimes \sigma_2, \quad (2.1)$$

σ_i designate the Pauli matrices. Allowing for identities $\gamma_i^* = \gamma_i, \gamma_4^* = -\gamma_4, \partial_i^* = \partial_i, \partial_4^* = -\partial_4,$ we get

$$\left(\gamma_1 \partial_1 + \gamma_2 \partial_2 + \gamma_3 \partial_3 + \gamma_4 \partial_4 + m\right)\psi^* = 0. \quad (2.2)$$

Summing and subtracting two last equations, we obtain $(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\Psi = 0,$ where the 8-component wave function Ψ has the structure

$$\Psi = (\psi^r, \psi^i), \psi^r = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi + \psi^*), \psi^i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi - \psi^*), \quad (2.3)$$

the matrices Γ_μ are defined by the formula $\Gamma_\mu = I_2 \otimes \gamma_\mu$. In this Majorana basis, the most general form of transformation Q (1.2) is

$$Q = \begin{vmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{vmatrix} \otimes I_4 = q \otimes I_4, \quad q_{mn} \in C; \quad (2.4)$$

8-dimensional symmetry transformations are decomposed into the linear combinations

$$Q = \omega_0 I + \omega_1 J_1 + \omega_2 J_2 + \omega_3 J_3, \quad (2.5)$$

the matrices J_k satisfy the commutation relations for $su(2)$:

$$J_1 = \frac{\sigma_1}{2} \otimes I_4, J_2 = \frac{i\sigma_2}{2} \otimes I_4, J_3 = \frac{\sigma_3}{2} \otimes I_4, \quad [J_i, J_j]_- = i\varepsilon_{ijk} J_k. \quad (2.6)$$

The above Majorana condition leads to the following restrictions on parameters: ω_1 is imaginary, and ω_2, ω_3 are real, below we will apply the notations $\omega_1 = i\Omega_1, \omega_2 = \Omega_2, \omega_3 = \Omega_3$. The determinant of the Q equals

$$\det Q = \left(-1-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(1-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(-i-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(i-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)+1;$$

because the total multiplier at Q has no physical meaning, we set $\det Q = +1$, so obtaining

$$\left(-1-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(1-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(-i-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)\times$$
$$\times\left(i-\omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2\right)=0.$$

whence we get two alternative possibilities

$$\Omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2=1, \quad \Omega_1{}^2-\omega_2{}^2-\omega_3{}^2+\omega_0{}^2=-1. \tag{2.7}$$

The existence of Lagrangian formulation (1.2) leads to additional restrictions: the symmetry transformation may include only one generator J_1 :

$$Q = \omega_0 I + i\Omega_1 J_1; \tag{2.8}$$

correspondingly relations (2.7) take on the form

$$\Omega_1{}^2+\omega_0{}^2=1, \quad \Omega_1{}^2+\omega_0{}^2=-1. \tag{2.9}$$

It is readily verified that the Majorana condition forbids the second variant in (2.9). The finite transformation has the structure

$$\psi^{r'} = \omega_0\psi^r + i\Omega_1\psi^i, \ \psi^{i'} = \omega_0\psi^i + i\Omega_1\psi^r, \quad \Omega_1{}^2+\omega_0{}^2=1. \tag{2.10}$$

Real and imaginary parts get entangled by this transformation, however the spiting into real and imaginary parts is not destroyed. Transformations (2.10) make up the Abelian group $U(1)$.

In fact, this model can be easily reduced to the form when we may speak about two 8-dimensional Majorana fields, real and imaginary. Indeed, let it be $i\psi_i = \overline{\phi}_r, i\psi_r = \overline{\phi}_i$, then (2.9) are re-written as follows

$$\psi_{r'} = \omega_0\psi_r + \Omega_1\overline{\phi}_r, \quad \psi_i{}' = \omega_0\psi_i + \Omega_1\overline{\phi}_i.$$

3 The System of Two Dirac Fields

Let us consider the system of two Dirac fields

$$(\gamma_\mu\partial_\mu + m)\psi_1 = 0, \quad (\gamma_\mu\partial_\mu + m)\psi_2 = 0, \tag{3.1}$$

where ψ_1, ψ_2 stand for two bispinors, as in the above we apply the Dirac matrices to Majorana basis. Further we derive the standard matrix form of the 16-component equation

$$(\Gamma_\mu\partial_\mu + m)\Psi = 0, \ \Psi = (\psi_1^r, \psi_2^r; \psi_1^i, \psi_2^i), \quad \Gamma_\mu = I_4 \otimes \gamma_\mu. \tag{3.2}$$

The most general form of the relevant symmetry transformations should have the structure $Q = q \otimes I_4$, where q is a certain 4×4 matrix. This matrix can be decomposed into the complete set $I_4, \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4, \gamma_\mu, \gamma_\mu\gamma_5, \gamma_\mu\gamma_\nu$, where indices in $\gamma_\mu\gamma_\nu$ take the the values $\{23, 31, 12, 14, 24, 34\}$. Therefore, the transformations Q may be presented with the help of 16 basic elements

$$I_{16}, J^\mu = \gamma_\mu \otimes I_4, J^5 = \gamma_5 \otimes I_4, \quad J^{\mu 5} = i\gamma_\mu\gamma_5 \otimes I_4, J^{\mu\nu} = i\gamma_\mu\gamma_\nu \otimes I_4; \tag{3.3}$$

expressions for $J^{\mu 5}$ and $J^{\mu\nu}$ are multiplied by imaginary unit in order to have corresponding generators Hermitian. Let us numerate the generators as follows

$$J^\mu \to J_1 ... J_4, J^5 \to J_5, \quad J^{\mu 5} \to J_6 ... J_9, J^{\mu\nu} \to J_{10} ... J_{15}. \tag{3.4}$$

Applying the Majorana requirement to 1-parametric transformations

$$Q = 1 + \omega_s J_s, \ s = 1, ..., 15, \text{ (no summing in } s) \tag{3.5}$$

we get additional restrictions on parameters:

– imaginary $\omega_1, \omega_3, \omega_7, \omega_9, \omega_{11}, \omega_{14}$;

– real $\omega_2, \omega_4, \omega_5, \omega_6, \omega_8, \omega_{10}, \omega_{12}, \omega_{13}, \omega_{15}$.

From the Lagrangian invariance we get 15 restrictions on generators

$$(\omega_s J_s)^+ \eta = -\eta\omega_s J_s, \ s = 1, ..., 15, \ \eta = I_4 \otimes \gamma_4. \tag{3.6}$$

The direct verification of equations (3.6) with the use of explicit expressions for generators shows that only 6 generators satisfy these constraints $J_1, J_3, J_7, J_9, J_{11}, J_{14}$. Thus, the Lagrangian is invariant only under 1-parametric transformations with generators

$$J_1 = \gamma_1 \otimes I_4, J_3 = \gamma_3 \otimes I_4, \quad J_{11} = i\gamma_3\gamma_1 \otimes I_4, J_7 = i\gamma_2\gamma_5 \otimes I_4, \quad J_9 = i\gamma_4\gamma_5 \otimes I_4, J_{14} = i\gamma_2\gamma_4 \otimes I_4. \tag{3.7}$$

These generators lead to finite transformations with the structure

$$\begin{vmatrix} R_1 & iR_2 \\ iR_3 & R_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_+ \\ i\Psi_- \end{vmatrix}, \tag{3.8}$$

where R_1, R_2, R_3, R_4 are real 8×8 matrices, and Ψ_+, Ψ_- are real 8-dimensional columns. These transformations entangle 8 real and 8 imaginary components, however the splitting into real and imaginary part is not destroyed. It is readily verified that two triples of generators

$$S_1 = \frac{1}{2}J_7, S_2 = \frac{1}{2}J_9, S_3 = \frac{1}{2}J_{14}; \quad S_1' = \frac{1}{2}J_1, S_2' = \frac{1}{2}J_3, S_3' = \frac{1}{2}J_{11}, \tag{3.9}$$

obey the Lie algebra $su(2)$: $[S_i, S_j]_- = iS_k\varepsilon_{ijk}$ and $[S_i', S_j']_- = iS_k'\varepsilon_{ijk}$. These two sets commute with each other, $[S_i, S_j']_- = 0$. In other words, these transformations make up a 6-parametric group with the structure $SU(2) \otimes SU(2)$.

4 The System of Three Dirac Fields

Let us consider the system of three Dirac fields

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi_i = 0, \; i = 1,2,3, \qquad (4.1)$$

where ψ_1, ψ_2, ψ_3 are bispinors. We obtain the standard matrix form of the equation

$$(\Gamma_\mu \partial_\mu + m)\Psi = 0, \; \Gamma_\mu = I_6 \otimes \gamma_\mu, \quad \Psi = (\psi_1^r, \psi_2^r, \psi_3^r, \psi_1^i, \psi_2^i, \psi_3^i). \qquad (4.2)$$

Intrinsic symmetry transformations Q are presented by complex 24×24 matrices, which commute with the matrices Γ_μ. In Majorana basis, the most general structure of the matrix Q is $Q = q \otimes I_4$, where q is a complex 6×6 matrix. This matrix q can be decomposed in the linear combination of the basic matrices

$$I_6, \quad \sigma_i \otimes I_3, \quad I_2 \otimes \alpha_A, \quad \sigma_i \otimes \alpha_A; \qquad (4.3)$$

where α_A stand for generators of the group $SU(3)$, $A = 1 \div 8$.

Let us take 8 Hermitian generators α_A for the group $SU(3)$ as follows [23]:

$$\alpha_1 = e^{11} - e^{33}, \; \alpha_2 = e^{22} - e^{33}, \; \alpha_3 = e^{23} + e^{32},$$
$$\alpha_4 = e^{13} + e^{31}, \alpha_5 = e^{12} + e^{21}, \alpha_6 = -i(e^{23} - e^{32}), \qquad (4.4)$$
$$\alpha_7 = -i(e^{31} - e^{13}), \; \alpha_8 = -i(e^{12} - e^{21}),$$

where e_{ij} stand for the elements of the complete matrix algebra. Their explicit form is

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \; \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \; \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix},$$
$$\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \; \alpha_5 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \qquad (4.5)$$
$$\alpha_6 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{vmatrix}, \; \alpha_7 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{vmatrix}, \; \alpha_8 = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

They relate to Okubo matrices [24] in the following way

$$a_1^1 = \frac{1}{3}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \; a_1^2 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \; a_1^3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix},$$
$$a_2^1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \; a_2^2 = \frac{1}{3}\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix},$$
$$a_2^3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \; a_3^1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \qquad (4.6)$$
$$a_3^2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \; a_3^3 = \frac{1}{3}\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}.$$

We can easily derive the following relations between these two sets

$$\alpha_1 = 2a_1^1 + a_2^2, \; \alpha_2 = a_1^1 + 2a_2^2, \; \alpha_3 = a_2^3 + a_3^2,$$
$$\alpha_4 = a_1^3 + a_3^1, \; \alpha_5 = a_1^2 + a_2^1, \; \alpha_6 = -i(a_2^3 - a_3^2),$$
$$\alpha_7 = -i(a_1^3 - a_3^1), \; \alpha_8 = -i(a_1^2 - a_2^1).$$

In application of the group $SU(3)$, the Gell-Mann matrices are commonly used [23], they are related to the above matrices α_i (4.4) by the formulas

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}\alpha_5, \; \lambda_2 = \frac{1}{2}\alpha_8, \; \lambda_3 = \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2),$$
$$\lambda_4 = \frac{1}{2}\alpha_4, \; \lambda_5 = \frac{1}{2}\alpha_7, \; \lambda_6 = \frac{1}{2}\alpha_3, \qquad (4.8)$$
$$\lambda_7 = \frac{1}{2}\alpha_6, \; \lambda_8 = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\alpha_1 + \alpha_2).$$

Let us turn back to the study of the symmetries Q for a 24-component field. The relevant transformations are determined by 35 Hermitian generators; it is convenient to numerate them

$$J_1 ... J_3 \to (\sigma_i \otimes I_3) \otimes I_4,$$
$$J_4 ... J_{11} \to (I_2 \otimes \alpha_A) \otimes I_4, \qquad (4.9)$$
$$J_{12} ... J_{35} \to (\sigma_i \otimes \alpha_A) \otimes I_4.$$

It should be noted that only generators J_1, J_2, J_3 have quadratic minimal polynomial, the remaining 32 generators have the cubic minimal polynomial: $3 \to \lambda^2 = 1; 32 \to \lambda^3 = \lambda.$ Minimal polynomials for generators based on Gell-Mann 3×3 matrices have more complex structure:

$$J_1, J_2, J_3 \to \lambda^2 = 1; \; J_{11} \to \lambda^2 + \frac{\sqrt{3}}{3}\lambda = \frac{2}{3};$$
$$J_{19}, J_{27}, J_{35} \to \lambda^4 - \frac{5}{3}\lambda^2 = \frac{4}{9}; \qquad (4.10)$$

for 28 remaining generators the minimal polynomials are cubic $\lambda^3 = \lambda.$ Below we will apply the generators (4.9).

The Majorana condition for 1-parametric transformations leads to the following constraints for 35 parameters ω:

– real

$$\omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_6, \omega_7, \omega_9,$$
$$\omega_{11}, \omega_{13}, \omega_{16}, \omega_{31}, \omega_{33}, \omega_{35}; \qquad (4.11)$$
$$\omega_{18}, \omega_{20}, \omega_{22}, \omega_{23}, \omega_{25}, \omega_{27}, \omega_{28}, \omega_{30},$$

– imaginary

$$\omega_1, \omega_5, \omega_8, \omega_{10}, \omega_{12}, \omega_{14}, \omega_{15}, \omega_{17},$$
$$\omega_{19}, \omega_{21}, \omega_{24}, \omega_{26}, \omega_{29}, \omega_{32}, \omega_{34}. \qquad (4.12)$$

The Lagrangian requirement (1.6) is satisfied only for imaginary parameters (4.12).

Thus, the intrinsic symmetry transformations are determined by the following 15 generators

$$J_1 = (\sigma_1 \otimes I_3) \otimes I_4, \; J_9 = (I_2 \otimes \alpha_6) \otimes I_4,$$
$$J_{10} = (I_2 \otimes \alpha_7) \otimes I_4, \; J_{11} = (I_2 \otimes \alpha_8) \otimes I_4,$$
$$J_{12} = (\sigma_1 \otimes \alpha_1) \otimes I_4, \; J_{13} = (\sigma_1 \otimes \alpha_2) \otimes I_4,$$

$$J_{14}=(\sigma_1\otimes\alpha_3)\otimes I_4,\ J_{15}=(\sigma_1\otimes\alpha_4)\otimes I_4,$$
$$J_{16}=(\sigma_1\otimes\alpha_5)\otimes I_4,\ J_{25}=(\sigma_2\otimes\alpha_6)\otimes I_4,$$
$$J_{26}=(\sigma_2\otimes\alpha_7)\otimes I_4,\ J_{27}=(\sigma_2\otimes\alpha_8)\otimes I_4,$$
$$J_{33}=(\sigma_3\otimes\alpha_6)\otimes I_4,\ J_{34}=(\sigma_3\otimes\alpha_7)\otimes I_4,$$
$$J_{35}=(\sigma_3\otimes\alpha_8)\otimes I_4. \quad (4.13)$$

Only the generator J_1 has a quadratic minimal polynomial, the 14 remaining ones have a cubic minimal polynomial. The study of commutators for generators shows that there exist two triples of generators which make up subgroups isomorphic to $su(2)$:

$$\frac{1}{2}(J_9,J_{13},J_{14})=(S_1,S_2,S_3),$$
$$\frac{1}{2}(J_{10},J_{12},J_{15})=(S_1',S_2',S_3'). \quad (4.14)$$

All the generators in sets (4.14) have cubic minimal polynomial; besides, the generators from different triples commute with each other. Recall that these triples are realized on the matrices of dimension 24×24.

Let us write down the structure of the finite 1-parametric transformations relation to generators (4.13). The finite 1-parametric transformations for generators with minimal polynomial are

$$U=1+i\sin\alpha\lambda+(\cos\alpha-1)\lambda^2; \quad (4.15)$$

for the case of a quadratic polynomial we get

$$U=\cos\alpha-i\sin\alpha\lambda.$$

Because all 15 one-parametric transformations are symmetries, we can conclude that all products of them will provide us with symmetries as well.

5 The System of 4 Dirac Fields

Let us consider the system of 4 Dirac fields

$$(\gamma_\mu\partial_\mu+m)\psi_i=0,\quad (i=1,2,3,4), \quad (5.1)$$

whence we get the standard matrix equation

$$(\Gamma_\mu\partial_\mu+m)\Psi=0,\ \Gamma_\mu=I_8\otimes\gamma_\mu,$$
$$\Psi=(\psi_1^r,\psi_2^r,\psi_3^r,\psi_4^r,\psi_1^i,\psi_2^i\psi_3^i\psi_4^i). \quad (5.2)$$

Transformations of intrinsic symmetry Q are determined by complex 32×32 matrices, they should commute with the matrices Γ_μ. In Majorana basis the most general form of Q is as follows $Q=q\otimes I_4$, where q stands for a complex 8×8 matrix. It can be decomposed in the complete set of basic 8×8 matrices:

$$I_8,\gamma_\mu\otimes I_2,\gamma_5\otimes I_2,\gamma_\mu\gamma_5\otimes I_2,\gamma_\mu\gamma_\nu\otimes I_2,$$
$$\gamma_\mu\otimes\sigma_i,\gamma_5\otimes\sigma_i,\gamma_\mu\gamma_5\otimes\sigma_i,\gamma_\mu\gamma_\nu\otimes\sigma_i,I_4\otimes\sigma_i. \quad (5.3)$$

The symmetry transformations for a 32-component field are determined by 63 generators; let us list them as shown below

$$J_\mu\to J_1...J_4\to(\gamma_\mu\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_5\to J_5\to(\gamma_5\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_{\mu5}\to J_6...J_9\to i(\gamma_\mu\gamma_5\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_{[\mu\nu]}\to J_{10}...J_{15}\to i(\gamma_\mu\gamma_\nu\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_{\mu i}\to J_{16}...J_{27}\to(\gamma_\mu\otimes\sigma_i)\otimes I_4,$$
$$J_{5i}\to J_{28}...J_{30}\to(\gamma_5\otimes\sigma_i)\otimes I_4,$$
$$J_{[\mu5i]}\to J_{31}...J_{42}\to i(\gamma_\mu\gamma_5\otimes\sigma_i)\otimes I_4,$$
$$J_{[\mu\nu]i}\to J_{43}...J_{60}\to i(\gamma_\mu\gamma_\nu\otimes\sigma_i)\otimes I_4,$$
$$J_{4i}\to J_{61}...J_{63}\to(I_4\otimes\sigma_i)\otimes I_4. \quad (5.4)$$

All generators are Hermitian, and have a quadratic minimal polynomial, $J_{...}^2=I$. The Majorana condition for 1-parametric transformations leads to the constrains on 63 parameters ω:

– real 35

$$\omega_2,\omega_4,\omega_5,\omega_6,\omega_8,\omega_{10},\omega_{12},\omega_{13},\omega_{15},$$
$$\omega_{17},\omega_{19},\omega_{21},\omega_{23},\omega_{25},\omega_{27},\omega_{28},\omega_{30},$$
$$\omega_{31},\omega_{33},\omega_{35},\omega_{37},\omega_{39},\omega_{41},\omega_{43},\omega_{45},\omega_{47},$$
$$\omega_{49},\omega_{51},\omega_{52},\omega_{54},\omega_{56},\omega_{58},\omega_{60},\omega_{61},\omega_{63}; \quad (5.5)$$

– imaginary 28

$$\omega_1,\omega_3,\omega_7,\omega_9,\omega_{11},\omega_{14},\omega_{16},\omega_{18},\omega_{20},$$
$$\omega_{22},\omega_{24},\omega_{26},\omega_{29},\omega_{32},\omega_{34},\omega_{36},\omega_{38},$$
$$\omega_{40},\omega_{42},\omega_{44},\omega_{46},\omega_{48},\omega_{50},\omega_{53},\omega_{55},\omega_{57},\omega_{59},\omega_{62}. \quad (5.6)$$

The Lagrangian formulation (1.6) of the theory is possible only for 28 one-parametric transformations with imaginary ω (5.6). Thus, the intrinsic symmetry transformations are determined by the 28 generators

$$J_1=(\gamma_1\otimes I_2)\otimes I_4, J_3=(\gamma_3\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_7=i(\gamma_2\gamma_5\otimes I_2)\otimes I_4, J_9=i(\gamma_4\gamma_5\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_{11}=i(\gamma_3\gamma_1\otimes I_2)\otimes I_4, J_{14}=i(\gamma_2\gamma_4\otimes I_2)\otimes I_4,$$
$$J_{16}=(\gamma_1\otimes\sigma_1)\otimes I_4, J_{18}=(\gamma_1\otimes\sigma_3)\otimes I_4,$$
$$J_{20}=(\gamma_2\otimes\sigma_2)\otimes I_4, J_{22}=(\gamma_3\otimes\sigma_1)\otimes I_4,$$
$$J_{24}=(\gamma_3\otimes\sigma_3)\otimes I_4, J_{26}=(\gamma_4\otimes\sigma_2)\otimes I_4,$$
$$J_{29}=(\gamma_5\otimes\sigma_2)\otimes I_4, J_{32}=i(\gamma_1\gamma_5\otimes\sigma_2)\otimes I_4,$$
$$J_{34}=i(\gamma_2\gamma_5\otimes\sigma_1)\otimes I_4, J_{36}=i(\gamma_2\gamma_5\otimes\sigma_3)\otimes I_4,$$
$$J_{38}=i(\gamma_3\gamma_5\otimes\sigma_2)\otimes I_4, J_{40}=i(\gamma_4\gamma_5\otimes\sigma_1)\otimes I_4,$$
$$J_{42}=i(\gamma_4\gamma_5\otimes\sigma_3)\otimes I_4, J_{44}=i(\gamma_2\gamma_3\otimes\sigma_2)\otimes I_4,$$
$$J_{46}=i(\gamma_3\gamma_1\otimes\sigma_1)\otimes I_4, J_{48}=i(\gamma_3\gamma_1\otimes\sigma_3)\otimes I_4,$$
$$J_{50}=i(\gamma_1\gamma_2\otimes\sigma_2)\otimes I_4, J_{53}=i(\gamma_1\gamma_4\otimes\sigma_2)\otimes I_4,$$
$$J_{55}=i(\gamma_2\gamma_4\otimes\sigma_1)\otimes I_4, J_{57}=i(\gamma_2\gamma_4\otimes\sigma_3)\otimes I_4,$$
$$J_{59}=i(\gamma_3\gamma_4\otimes\sigma_2)\otimes I_4, J_{62}=(I_4\otimes\sigma_2)\otimes I_4. \quad (5.7)$$

All the generators have dimension 32×32, and can be presented with the use of blocks of dimension 8×8. The study of the structure of these generators permits us to make the following conclusions.

1. Among the generators (5.6) one can separate 56 triples, each of them obeys the commutative relations of the Lie group $su(2)$. For instance the triples, (J_7,J_{70},J_{29}), (J_7,J_{32},J_{50}), (J_{70},J_{40},J_{55}) and so on.

2. For each of 56 triples there exist 10 other triples which commute with the generators from the first triple. For instance, the triple (J_{16},J_{36},J_{59}) commutes with the following 10 concomitant triples

$$(J_1, J_{20}, J_{50}), (J_1, J_{24}, J_{48}), (J_1, J_{29}, J_{32}),$$
$$(J_7, J_{70}, J_{29}), (J_7, J_{32}, J_{50}),$$
$$(J_{70}, J_{40}, J_{55}), (J_{20}, J_{40}, J_{48}), (J_{24}, J_{32}, J_{55}),$$
$$(J_{24}, J_{40}, J_{50}), (J_{29}, J_{48}, J_{55}). \quad (5.8)$$

The generators from the basic triple do not enter concomitant 10 triples

$$[J_{\text{basic}}, J^{A}_{\text{concomit}}]_- = 0,\ A = 1 \div 10;$$
$$J_{\text{basic}} \cap J^{A}_{\text{concomit}} = 0. \quad (5.9)$$

In other words, each triple generates 10 subgroups with the structure $su(2) \otimes su(2)$.

6 The System of One Massless Dirac Field

Let us consider one Dirac equation with zero mass $\gamma_\mu \partial_\mu \psi = 0$, it may be presented in matrix form $\Gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0$, where Ψ is an 8-component wave function (2.3). Because the field under consideration is massless, the intrinsic symmetry transformations may commute or anticommute with the basic matrices $[Q_1, \Gamma_\mu]_- = 0$, $[Q_2, \Gamma_\mu]_+ = 0$. The first condition was analyzed in the above. So we are to study only the second condition. The structure of symmetries Q_2 should be as follows $Q_2 = q_2 \otimes \gamma_5$, where q_2 stands for an arbitrary complex matrix 2×2. Because the matrix q_2 can be decomposed in the set of $I_2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, the symmetries Q_2 are determined by 4 elements (for massless cases, we will designate generators by symbol L):

$$L_1 = \sigma_1 \otimes \gamma_5,\ L_2 = \sigma_2 \otimes \gamma_5,$$
$$L_3 = \sigma_3 \otimes \gamma_5,\ L_0 = I_2 \otimes \gamma_5. \quad (6.1)$$

The Majorana condition leads to the following restrictions on parameters of 1-parametric transformations $Q_2 = 1 + \Omega L$: Ω_1 is real, Ω_2, Ω_3, Ω_0 are imaginary. The existence of the Lagrangian formulation (1.6) is possible only for one generator $L_1 = \sigma_1 \otimes \gamma_5$. Let us recall that the first symmetry transformation Q_1 leads to the following result

$$J_1 = \sigma_1 \otimes I_4,\ (\omega_1 \text{ is imaginary}). \quad (6.2)$$

We can see that transformations corresponding to J_1 and L_1 are substantially different. Let us consider the finite transformations Q_1 and Q_2:

$$Q_1 = a_0 I_8 + i a_1 J_1,\ Q_2 = b_0 I_8 + b_1 L_1; \quad (6.3)$$

a_i, b_i are real. For these symmetries, the Lagrangian condition $Q^+ \eta Q = \eta$ leads to restrictions

$$a_0^2 + a_1^2 = 1,\ b_0^2 - b_1^2 = 1. \quad (6.4)$$

Evidently, the product of Q_1 and Q_2 also is a symmetry transformation

$$Q = Q_1 Q_2 = Q_2 Q_1 =$$
$$= a_0 b_0 I_8 + a_0 b_1 L_1 + i b_0 a_1 J_1 + i a_1 b_1 J_1 L_1, \quad (6.5)$$

where $J_1 L_1 = L_1 J_1 = I_2 \otimes \gamma_5$. It is readily proved that the Lagrangian condition for the transformation (6.5) leads to restriction

$$(a_0^2 + a_1^2)(b_0^2 - b_1^2) = 1. \quad (6.6)$$

Imposing the proper normalization, we rewrite the formulas (6.3) as follows

$$Q_1 = \cos\alpha I_8 + i \sin\alpha J_1,$$
$$Q_2 = \cosh\beta I_8 + \sinh\beta L_1. \quad (6.7)$$

7 The System of Two Massless Fields

Let us consider the system of two equations

$$\gamma_\mu \partial_\mu \psi_1 = 0,\ \gamma_\mu \partial_\mu \psi_2 = 0 \Rightarrow \Gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0,$$
$$\Psi = (\psi_1^r, \psi_2^r, \psi_1^i, \psi_2^i). \quad (7.1)$$

The intrinsic symmetry transformations obey the commutation or anticommutation relations $[Q_1, \Gamma_\mu]_- = 0, [Q_2, \Gamma_\mu]_+ = 0$. The study of the commutation condition was performed in the above. Below we shall analyze the anticommutation condition. The structure of relevant matrix Q_2 should be $Q_2 = q \otimes \gamma_5$. The matrix $q_{4\times 4}$ can be decomposed into the set of 16 matrices

$$I_4, \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4, \gamma_\mu, \gamma_\mu\gamma_5, \gamma_\mu\gamma_\nu.$$

Therefore the intrinsic symmetry transformations Q_2 may be defined with the help of 15 generators

$$L^\mu = \gamma_\mu \otimes \gamma_5,\ L^5 = \gamma_5 \otimes \gamma_5,$$
$$L^{\mu 5} = i\gamma_\mu\gamma_5 \otimes \gamma_5,\ L^{\mu\nu} = i\gamma_\mu\gamma_\nu \otimes \gamma_5. \quad (7.2)$$

Let us numerate them as follows

$$L^\mu \to L_1 ... L_4,\ L^5 \to L_5,$$
$$L^{\mu 5} \to L_6 ... L_9,\ L^{\mu\nu} \to L_{10} ... L_{15}. \quad (7.3)$$

For 1-parametric transformations $Q_2 = 1 + \Omega L$, obeying the Majorana condition, we find the following restrictions on parameters

– real $\Omega_1, \Omega_3, \Omega_7, \Omega_9, \Omega_{11}, \Omega_{14}$;

– imaginary
$\Omega_2, \Omega_4, \Omega_5, \Omega_6, \Omega_8, \Omega_{10}, \Omega_{12}, \Omega_{13}, \Omega_{15}$.

The study of Lagrangian condition (1.6) shows that the appropriate are the generators corresponding to real-valued parameters

$$L_1 = \gamma_1 \otimes \gamma_5, L_3 = \gamma_3 \otimes \gamma_5, L_{11} = i\gamma_3\gamma_1 \otimes \gamma_5,$$
$$L_7 = i\gamma_2\gamma_5 \otimes \gamma_5, L_9 = i\gamma_4\gamma_5 \otimes \gamma_5, L_{14} = i\gamma_2\gamma_4 \otimes \gamma_5. \quad (7.4)$$

Let us study the Lagrangian condition for finite transformations Q_2 (1.3):

$$Q_2^+ \eta Q_2 = \eta,\ \eta = I_4 \otimes \gamma_4,$$
$$Q_2 = b_0 I_{16} + b_1 L_1 + b_2 L_3 + b_3 L_7 + b_4 L_9 + b_5 L_{11} + b_6 L_{14};$$

whence we find two solutions

1) $Q_2 = b_0 I_{16} + b_1 L_1 + b_2 L_3 + b_5 L_{11}$,
$b_0^2 - b_1^2 - b_2^2 - b_5^2 = 1$;

2) $Q_2 = b_0 I_{16} + b_3 L_7 + b_4 L_9 + b_6 L_{14}$,
$b_0^2 - b_3^2 - b_4^2 - b_6^2 = 1; \quad (7.5)$

all parameters b_i are real-valued, so in parametric space the signature is $(+,-,-,-)$.

Similarly, we consider the Lagrangian condition for finite transformations Q_1 (1.3)

$$Q_1^{+}\eta Q_1 = \eta, \ \eta = I_4 \otimes \gamma_4,$$
$$Q_1 = a_0 I_{16} + ia_1 J_1 + ia_2 J_3 +$$
$$+ia_3 J_7 + ia_4 J_9 + ia_5 J_{11} + ia_6 J_{14},$$

whence we obtain two solutions

$$1)\ Q_1 = a_0 I_{16} + ia_1 J_1 + ia_2 J_3 + ia_5 J_{11},$$
$$a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_5^2 = 1;$$
$$2)\ Q_1 = a_0 I_{16} + ia_3 J_7 + ia_4 J_9 + ia_6 J_{14},$$
$$a_0^2 + a_3^2 + a_4^2 + a_6^2 = 1; \qquad (7.6)$$

all parameters a_i are real, in the parametric space we have the signature $(+,+,+,+)$. In relations (7.5) and (7.6) all the generators are Hermitian.

Let us change the notations for the generators

$$S_1 = \frac{1}{2}J_7,\, S_2 = \frac{1}{2}J_9,\, S_3 = \frac{1}{2}J_{14},$$
$$S_1' = \frac{1}{2}J_1,\, S_2' = \frac{1}{2}J_3,\, S_3' = \frac{1}{2}J_{11}; \qquad (7.7)$$
$$s_1 = \frac{1}{2}L_7,\, s_2 = \frac{1}{2}L_9,\, s_3 = \frac{1}{2}L_{14},$$
$$s_1' = \frac{1}{2}L_1,\, s_2' = \frac{1}{2}L_3,\, s_3' = \frac{1}{2}L_{11}.$$

Then for symmetries Q_1 we get more symmetrical formulas

$$1)\ Q_1 = a_0 I_{16} + ia_3 S_1 + ia_4 S_2 + ia_6 S_3,$$
$$[S_i, S_j]_- = -iS_k \varepsilon_{ijk}, \qquad (7.8)$$
$$2)\ Q_1 = a_0 I_{16} + ia_1 S_1' + ia_2 S_2' + ia_5 S_3',$$
$$[S_i', S_j']_- = -iS_k' \varepsilon_{ijk},$$

in (7.8) we can see two commuting 3-parametric groups with the structure $su(2)$, $[S_i, S_j']_- = 0$. For the case Q_2 we have

$$1)\ Q_2 = b_0 I_{16} + b_3 s_1 + b_4 s_2 + b_6 s_3,$$
$$2)\ Q_2 = b_0 I_{16} + b_1 s_1' + b_2 s_2' + b_5 s_3'. \qquad (7.9)$$

We can see that all four triples of the generators from symmetries Q_1 and Q_2 are mixed in the following way:

$$[s_i, s_j]_- = -i\varepsilon_{ijk} S_k, [s_i', s_j']_- = -i\varepsilon_{ijk} S_k',$$
$$[S_i, s_j]_- = -is_k \varepsilon_{ijk}, [S_i', s_j']_- = -is_k' \varepsilon_{ijk}. \qquad (7.10)$$

Within the commutating relations (7.10) we can separate two 6-parametric subgroups:

– the first is

$$(a_0 I_{16} + ia_3 S_1 + ia_4 S_2 + ia_6 S_3)(b_0 I_{16} + b_3 s_1 + b_4 s_2 + b_6 s_3),$$
$$[S_i, S_j]_- = -iS_k \varepsilon_{ijk}, [s_i, s_j]_- = -iS_k \varepsilon_{ijk}, \qquad (7.11)$$
$$[S_i, s_j]_- = -is_k \varepsilon_{ijk};$$

– the second is

$$(a_0 I_{16} + ia_1 S_1' + ia_2 S_2' + ia_5 S_3')(b_0 I_{16} + b_1 s_1' + b_2 s_2' + b_5 s_3'),$$
$$[S_i', S_j']_- = -iS_k' \varepsilon_{ijk}, [s_i', s_j']_- = -iS_k' \varepsilon_{ijk}, \qquad (7.12)$$
$$[S_i', s_j']_- = -is_k' \varepsilon_{ijk}.$$

These groups are isomorphic to $SO(4)$ group (see in [25]). Thus, the complete symmetry group for 2 massless Dirac fields in Majorana approach is $\mathrm{SO(4)} \otimes \mathrm{SO(4)}$.

8 The System of Three Massless Fields

Let us consider the system of three Dirac fields

$$\gamma_\mu \partial_\mu \psi_i = 0\ (i = 1,2,3) \Rightarrow \Gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0,$$
$$\Psi = (\psi_1^r, \psi_2^r, \psi_3^r, \psi_1^i, \psi_2^i, \psi_3^i). \qquad (8.1)$$

For symmetry transformations, two alternative constraints may be imposed

$$[Q_1, \Gamma_\mu]_- = 0, \quad \text{or} \quad [Q_2, \Gamma_\mu]_+ = 0. \qquad (8.2)$$

The first restriction was analyzed in the above. Here we shall examine the second condition. The general structure of the transformations Q_2 may be as follows $Q_2 = q \otimes \gamma_5$, where q is an arbitrary complex 6×6 matrix. Any such matrix may be decomposed into the complete set

$$I_6,\ \sigma_i \otimes I_3,\ I_2 \otimes \alpha_A,\ \sigma_i \otimes \alpha_A, \qquad (8.3)$$

where α_A stands for the generators of group $SU(3)$ (see (4.4)), $A = 1 \div 8$. Therefore, intrinsic symmetry transformations can be determined with the help of 36 basic elements

$$L_i = (\sigma_i \otimes I_3) \otimes \gamma_5,\, L_A = (I_2 \otimes \alpha_A) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{iA} = (\sigma_i \otimes \alpha_A) \otimes \gamma_5; \qquad (8.4)$$

let us numerate them as follows

$$L_i \to L_1 ... L_3,\ L_A \to L_4 ... L_{11},\ L_{iA} \to L_{12} ... L_{35}. \qquad (8.5)$$

Taking into account the Majorana condition, for 1-parametric transformations of the type $Q_2 = 1 + \Omega L$, we find 21 and 15 restrictions on parameters Ω:

– imaginary

$$\Omega_2, \Omega_3, \Omega_4, \Omega_5, \Omega_6, \Omega_7, \Omega_8, \Omega_{17},$$
$$\Omega_{18}, \Omega_{19}, \Omega_{20}, \Omega_{21}, \Omega_{22}, \Omega_{23}, \qquad (8.6)$$
$$\Omega_{24}, \Omega_{28}, \Omega_{29}, \Omega_{30}, \Omega_{31}, \Omega_{32}, \Omega_{36};$$

– real

$$\Omega_1, \Omega_9, \Omega_{10}, \Omega_{11}, \Omega_{12}, \Omega_{13}, \Omega_{14}, \Omega_{15},$$
$$\Omega_{16}, \Omega_{25}, \Omega_{26}, \Omega_{27}, \Omega_{33}, \Omega_{34}, \Omega_{35}. \qquad (8.7)$$

Only 15 generators referring to real-valued parameters satisfy the Lagrangian condition:

$$L_1 = (\sigma_i \otimes I_3) \otimes \gamma_5,\, L_9 = (I_2 \otimes \alpha_6) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{10} = (I_2 \otimes \alpha_7) \otimes \gamma_5,\, L_{11} = (I_2 \otimes \alpha_8) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{12} = (\sigma_1 \otimes \alpha_1) \otimes \gamma_5,\, L_{13} = (\sigma_1 \otimes \alpha_2) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{14} = (\sigma_1 \otimes \alpha_3) \otimes \gamma_5,\, L_{15} = (\sigma_1 \otimes \alpha_4) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{16} = (\sigma_1 \otimes \alpha_5) \otimes \gamma_5,\, L_{25} = (\sigma_2 \otimes \alpha_6) \otimes \gamma_5, \qquad (8.8)$$
$$L_{26} = (\sigma_2 \otimes \alpha_7) \otimes \gamma_5,\, L_{27} = (\sigma_2 \otimes \alpha_8) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{33} = (\sigma_3 \otimes \alpha_6) \otimes \gamma_5,\, L_{34} = (\sigma_3 \otimes \alpha_7) \otimes \gamma_5,$$
$$L_{35} = (\sigma_3 \otimes \alpha_8) \otimes \gamma_5;$$

referring to transformations Q_1 15 symmetry generators were given while considering the massive case (4.13).

Thus, for the case of three massless fields, we have found 30-parametric group of intrinsic symmetry. By direct calculation, we can readily find generators all triples with $su(2)$-structure in the set of 30×30. In particular, among 15 generators of the type Q_1 there exist only two such triples

$$Q_1 \quad (J_9, J_{13}, J_{14}), (J_{10}, J_{12}, J_{15}); \qquad (8.9)$$

among 15 generators of the type Q_2 also exist only two such triples:

$$Q_2 \quad (L_9, L_{13}, L_{14}), (L_{10}, L_{12}, L_{15}). \qquad (8.10)$$

9 The System of Four Massless Fields

Let us consider the system of four Dirac fields

$$\begin{gathered}\gamma_\mu \partial_\mu \psi_i = 0 \ (i = 1,2,3,4) \Rightarrow \Gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0,\\ \Psi = (\psi_1^r, \psi_2^r, \psi_3^r, \psi_4^r; \psi_1^i, \psi_2^i, \psi_3^i, \psi_4^i).\end{gathered} \qquad (9.1)$$

Intrinsic symmetry transformations should satisfy relations $[Q_1, \Gamma_\mu]_- = 0$ or $[Q_2, \Gamma_\mu]_+ = 0$.

Because the first condition was studied when considering the massive case, we will examine only the symmetries of type Q_2. Their general structure may be of the form $Q_2 = q \otimes \gamma_5$ where q is an 8×8 complex matrix. Any matrix $q_{8\times 8}$ may be decomposed in the set of 64 elements

$$\begin{gathered}I_8, \gamma_\mu \otimes I_2, \gamma_5 \otimes I_2, \gamma_\mu\gamma_5 \otimes I_2, \gamma_\mu\gamma_\nu \otimes I_2,\\ \gamma_\mu \otimes \sigma_i, \gamma_5 \otimes \sigma_i, \gamma_\mu\gamma_5 \otimes \sigma_i, \gamma_\mu\gamma_\nu \otimes \sigma_i, I_4 \otimes \sigma_i.\end{gathered} \qquad (9.2)$$

The symmetries for this field are determined by 63 generators; they may be listed as follows

$$\begin{gathered}L_\mu \to L_1 ... L_4 \to (\gamma_\mu \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_5 \to L_5 \to (\gamma_5 \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{\mu 5} \to L_6 ... L_9 \to i(\gamma_\mu\gamma_5 \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{[\mu\nu]} \to L_{10} ... L_{15} \to i(\gamma_\mu\gamma_\nu \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{\mu i} \to L_{16} ... L_{27} \to (\gamma_\mu \otimes \sigma_i) \otimes \gamma_5,\\ L_{5i} \to L_{28} ... L_{30} \to (\gamma_5 \otimes \sigma_i) \otimes \gamma_5,\\ L_{[\mu 5 i]} \to L_{31} ... L_{42} \to i(\gamma_\mu\gamma_5 \otimes \sigma_i) \otimes \gamma_5,\\ L_{[\mu\nu]i} \to L_{43} ... L_{60} \to i(\gamma_\mu\gamma_\nu \otimes \sigma_i) \otimes \gamma_5,\\ L_{4i} \to L_{61} ... L_{63} \to (I_4 \otimes \sigma_i) \otimes \gamma_5,\end{gathered} \qquad (9.3)$$

where $i = 1 \div 3, \mu, \nu = 1 \div 4$, $[\mu\nu] = 23, 31, 12, 14, 24, 34.$ All generators have the quadratic minimal equation, $L^2 = I$. The Majorana condition for 1-parametric transformations leads to restrictions on parameters Ω:

28 real parameters

$$\begin{gathered}\Omega_1, \Omega_3, \Omega_7, \Omega_9, \Omega_{11}, \Omega_{14}, \Omega_{16}, \Omega_{18}, \Omega_{20}, \Omega_{22},\\ \Omega_{24}, \Omega_{26}, \Omega_{29}, \Omega_{32}, \Omega_{34}, \Omega_{36}, \Omega_{38}, \Omega_{40}, \Omega_{42},\\ \Omega_{44}, \Omega_{46}, \Omega_{48}, \Omega_{50}, \Omega_{53}, \Omega_{55}, \Omega_{57}, \Omega_{59}, \Omega_{62};\end{gathered} \qquad (9.4)$$

35 imaginary parameters

$$\begin{gathered}\Omega_2, \Omega_4, \Omega_5, \Omega_6, \Omega_8, \Omega_{10}, \Omega_{12}, \Omega_{13}, \Omega_{15}, \Omega_{17}, \Omega_{19},\\ \Omega_{21}, \Omega_{23}, \Omega_{25}, \Omega_{27}, \Omega_{28}, \Omega_{30}, \Omega_{31}, \Omega_{28}, \Omega_{30},\\ \Omega_{31}, \Omega_{33}, \Omega_{35}, \Omega_{37}, \Omega_{39}, \Omega_{41}, \Omega_{43}, \Omega_{45}, \Omega_{47},\\ \Omega_{49}, \Omega_{51}, \Omega_{52}, \Omega_{54}, \Omega_{56}, \Omega_{58}, \Omega_{60}, \Omega_{61}, \Omega_{63}.\end{gathered} \qquad (9.5)$$

The Lagrangian condition (1.6) is satisfied only for 28 one-parametric transformations with real-valued Ω (9.4). Thus, the appropriate symmetries of the type Q_2 are determined by the following 28 generators:

$$\begin{gathered}L_1 = (\gamma_1 \otimes I_2) \otimes \gamma_5, L_3 = (\gamma_3 \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_7 = i(\gamma_2\gamma_5 \otimes I_2) \otimes \gamma_5, L_9 = i(\gamma_4\gamma_5 \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{11} = i(\gamma_3\gamma_1 \otimes I_2) \otimes \gamma_5, L_{14} = i(\gamma_2\gamma_4 \otimes I_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{16} = (\gamma_1 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5, L_{18} = (\gamma_1 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5,\\ L_{20} = (\gamma_2 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5, L_{22} = (\gamma_3 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5,\\ L_{24} = (\gamma_3 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5, L_{26} = (\gamma_4 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{29} = (\gamma_5 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5, L_{32} = i(\gamma_1\gamma_5 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{34} = i(\gamma_2\gamma_5 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5, L_{36} = i(\gamma_2\gamma_5 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5,\\ L_{38} = i(\gamma_3\gamma_5 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5, L_{40} = i(\gamma_4\gamma_5 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5,\\ L_{42} = i(\gamma_4\gamma_5 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5, L_{44} = i(\gamma_2\gamma_3 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{46} = i(\gamma_3\gamma_1 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5, L_{48} = i(\gamma_3\gamma_1 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5,\\ L_{50} = i(\gamma_1\gamma_2 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5, L_{53} = i(\gamma_1\gamma_4 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5,\\ L_{55} = i(\gamma_2\gamma_4 \otimes \sigma_1) \otimes \gamma_5, L_{57} = i(\gamma_2\gamma_4 \otimes \sigma_3) \otimes \gamma_5,\\ L_{59} = i(\gamma_3\gamma_4 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5, L_{62} = (I_4 \otimes \sigma_2) \otimes \gamma_5.\end{gathered} \qquad (9.6)$$

Their explicit form is omitted because of their bulkiness. All the generators have the dimension 32×32, they may be presented shorter with the use of blocks of dimension 8×8. Collecting together the generators of type Q_2 (9.6) and generators of type Q_1 (5.7), we get the complete symmetry group for the system of 4 massless fields.

The detailed study of the structure of these generators leads to the following conclusions.

1. Among all the generators of types Q_1 and Q_2 (see (5.6) and (9.6)) one can find 56 pairs of triples; in each pair the 6 involved operators obey the commutation rules for algebra $so(4)$. For instance, two examples are

$$(J_1, J_3, J_{11}) \in Q_1, (L_1, L_3, L_{11}) \in Q_2,$$

and

$$(J_7, J_9, J_{14}) \in Q_1, (L_7, L_9, L_{14}) \in Q_2.$$

The complete list of pairs of triples has been found. It should be noted that each triple of the type Q_1 obeys the $su(2)$ algebra.

2. For each 6-element set there exist 10 other sets (each of 6 elements) that commute with the initial set. For instance, the basic set $(J_1, J_3, J_{11}, L_1, L_3, L_{11})$ commutes with the following ones (each with the $so(4)$ structure):

$$\begin{gathered}(J_7, J_9, J_{14}, L_7, L_9, L_{14}), (J_7, J_{40}, J_{55}, L_7, L_{40}, L_{55}),\\ (J_7, J_{42}, J_{57}, L_7, L_{42}, L_{57}), (J_9, J_{34}, J_{55}), L_9, L_{34}, L_{55}),\\ (J_9, J_{36}, J_{57}, L_9, L_{36}, L_{57}), (J_{14}, J_{34}, J_{40}, L_{14}, L_{34}, L_{40}),\\ (J_{14}, J_{36}, J_{42}, L_{14}, L_{36}, L_{42}), (J_{34}, J_{36}, J_{63}, L_{34}, L_{36}, L_{63}),\\ (J_{40}, J_{42}, J_{62}, L_{40}, L_{42}, L_{62}), (J_{35}, J_{57}, J_{62}, L_{35}, L_{57}, L_{62}).\end{gathered}$$

The generators from the basic set do not enter the 10 concomitants sets:

$$[J_{\text{basic}}, J^{A}_{\text{concomit}}]_{-} = 0, J_{\text{basic}} \cap J^{A}_{\text{concomit}} = 0,$$
$$[L_{\text{basic}}, L^{A}_{\text{concomit}}]_{-} = 0, L_{\text{basic}} \cap L^{A}_{\text{concomit}} = 0, A = 1 \div 10.$$

In other words, each basic 6-element set gives rise to the algebra with structure $so(4) \otimes so(4)$.

Conclusion

In the separate paper, we presented the results of the analysis of internal symmetries for quantized Dirac fields, massive and massless ones; also we studied the internal symmetries in presents of electromagnetic and gravitation fields.

The authors are grateful to Professor V.A. Pletyuchov for the assistance provided.

REFERENCES

1. *Dirac*, *P.A.M.* Relativistic wave equations / P.A.M. Dirac // Proc. Roy. Soc. – 1936. – Vol. A155. – P. 447–459.

2. *Fierz*, *M.* On relativistic wave equations for particles of arbitrary spin in an electromagnetic field / M. Fierz, W. Pauli // Proc. Roy. Soc. – 1939. – Vol. A173. – P. 211–232.

3. *Fierz*, *M.* Über die relativistische theorie kräftefreier teilchen mit beliebigem spin / M. Fierz // Helv. Phys. Acta. – 1939. – Vol. 12, № 1. – P. 3–37.

4. *Bhabha*, *H.J.* Relativistic wave equations for the elementary particles / H.J. Bhabha // Rev. Mod. Phys. – 1945. – Vol. 17. – P. 200–216.

5. *Harish-Chandra*. Relativistic equations for elementary particles / Harish-Chandra // Proc. Roy. Soc. – 1948. – Vol. A192. – P. 195–218.

6. Gel'fand, I.M. General relativistic equations and infinite-dimensional representations of the Lorentz group / I.M. Gel'fand, A.Ya. Yaglom // JETP. – 1948. – Vol. 18, № 8. – P. 703–733.

7. *Fedorov*, *F.I.* Projective operators in the theory of elementary particles / F.I. Fedorov // JETP. – 1958. – Vol. 35. – P. 495–498.

8. *Fedorov*, *F.I.* On transformation of 4-dimensional vectors / F.I. Fedorov, A.A. Bogush // Doklady AN BSSR. – 1962. – Vol. 6, № 11. – P. 690–693.

9. *Shelepin*, *L.A.* Covariant theory of relativistic weave equations for particles with arbitrary spin / L.A. Shelepin // FIAN Proceedings, USSR. – 1964. – Vol. 30. – P. 253–321.

10. *Fuschich*, *V.I.* On new and old symmetries of the Maxwell and Dirac equations / V.I. Fuschich, A.G. Nikitin // Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei. – 1983. – Vol. 14, № 1. – P. 5–57.

11. *Fuschich*, *V.I.* On a new method of studying the group properties of equations of mathematical physics / V.I. Fuschich // DAN USSR. – 1979. – Vol. 246, № 4. – P. 846–850.

12. *Darwin*, *C.G.* The electron as a vector wave / C.G. Darwin // Proc. Roy. Soc. – 1927. – A116. – P. 227–253.

13. *Kähler*, *E.* Der innere Differentialkul / E. Kähler // Rendiconti di math. (Roma). – 1962. – Ser. 5. – Vol. 21, № 3, 4. – P. 425–523.

14. *Strazhev*, *V.I.* The Dirac – Kähler equation. Classical field / V.I. Strazhev, I.A. Satikov, D.A. Tsionenko. – Minsk: BSU, 2007. – 195 p.

15. *Strazhev*, *V.I.* On dial symmetry for vector field of general type / V.I. Strazhev // Acta Physica Polonica. – 1978. – Vol. B9, № 5. – P. 449–458.

16. *Bogush*, *A.A.* On the group of the intrinsic symmetry for 16-component theory of vector particles / A.A. Bogush, S.I. Kruglov, V.I. Strazhev // Doclady AN BSSR. – 1978. – Vol. 22, № 10. – P. 893–895.

17. *Strazhev*, *V.I.* Dial symmetry of relativistic wave equations / V.I. Strazhev , V.A. Pletyuchov // Acta Physica Polonica. – 1981. – Vol. B12, № 7. – P. 651–664.

18. *Strazhev*, *B.I.* On Dirac like relativistic wave equations / V.I. Strazhev, V.A. Pletyuchov // Russian Physics Journal. – 1983. – № 12. – P. 38–41.

19. *Satikov*, *I.A.* On quantum description of the Dirac – Kähler field / I.A. Satikov, V.I. Strazhev // Theoretical and Mathematical Physics. – 1987. – Vol. 73, № 1. – P. 16–25.

20. *Pauli*, *W.* On the conservation of the lepton charge / W. Pauli // Nuovo Cimento. – 1957. – Vol. 6. – P. 204–214.

21. *Gürsey*, *F.* Connection of charge independence and barion number conservation with the Pauli transformation / F. Gürsey // Nuovo Cimento. – 1957. – Vol. 8. – P. 411–415.

22. *Davydov*, *A.S.* Quantum mechanics / A.S. Davydov. – Moscow: Science, 1973. – 704 p.

23. *Bogush*, *A.A.* Introduction to field theory to gauge field theory of electroweak interactioins / A.A. Bogush. – Minsk: Science and Tehcnics, 1987. – 359 p.

24. *Rumer*, *Yu.B.* The theory of unitary symmetry / Yu.B. Rumer, A.I, Fet. – Moscow: Science, 1970. – 405 p.

25. *Red'kov V.V.* Fields of particles in Riemannian space-time and the Lorentz group / V.M. Red'kov. – Minsk: Belarus Science, 2009. – 400 p.

Поступила в редакцию 22.12.2023.

Информация об авторах

Андрусевич Павел Петрович – преподаватель

Редьков Виктор Михайлович – д.ф.-м.н., профессор

ФИЗИКА

УДК 535.42
DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_16
EDN: ULNKFQ

ТМ МОДЫ ВЕКТОРНЫХ ДЕКАРТОВЫХ ПУЧКОВ КУММЕРА КОНЕЧНОЙ МОЩНОСТИ

С.С. Гиргель

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

TM MODES OF VECTOR CARTESIAN KUMMER BEAMS WITH TRANSFERABLE LIMITED POWER

S.S. Girgel

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Предложены новые решения параболического уравнения, описывающие векторные декартовы параксиальные ТМ световые пучки Куммера. Установлены допустимые значения свободных параметров, при которых пучки Куммера переносят конечную мощность и являются физически реализуемыми. Выполнено графическое моделирование и проведен соответствующий анализ эллипсов поляризации, интенсивности и поперечных потоков энергии векторных параксиальных ТМ световых пучков Куммера.

Ключевые слова: *ТМ-моды*, *векторные пучки*, *пучки Куммера*, *поперечные потоки энергии.*

Для цитирования: *Гиргель*, *С.С.* ТМ моды векторных декартовых пучков Куммера конечной мощности / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 16–21. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_16. – EDN: ULNKFQ

Abstract. New vector solutions of the parabolic equation describing vector Cartesian paraxial TM Kummer light beams are proposed. The admissible values of free parameters at which Kummer beams transfer limited power are established and are physically realized. The polarization and energy properties of such beams are investigated. The graphic modeling is executed and the corresponding analysis of the ellipses of polarization, intensity and transverse energy fluxes of vector paraxial TM Kummer light beams is carried out.

Keywords: *TM modes*, *vector beams*, *Kummer beams*, *transverse energy fluxes.*

For citation: *Girgel*, *S.S.* TM modes of vector cartesian Kummer beams with transferable limited power / S.S. Girgel // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 16–21. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_16 (in Russian). – EDN: ULNKFQ

Введение

Обычно исследователи ограничиваются изучением и применением скалярных световых пучков [1]–[5]. Векторные световые пучки с однородной поляризацией по поперечному сечению пучка используют формализм скалярных пучков [6]. Пучки с неоднородной поляризацией изучаются и применяются значительно реже. В [7] исследовались ТЕ и ТМ гауссовы моды. В работе Фадеевой [8] обсуждаются поляризационные свойства только стандартных ТЕ и ТМ пучков Эрмита – Гаусса при $Z = 0$. Недавно нами исследовались ТМ моды векторных циркулярных пучков Куммера [9] и Бесселя – Гаусса [10], их энергетические и поляризационные свойства.

Перейдём теперь к обсуждению неоднородно поляризованных векторных световых пучков с декартовой симметрией. В настоящей работе мы будем изучать параксиальные векторные декартовы пучки Куммера с неоднородной поляризацией (ТМ моды), их поляризационные и энергетические свойства. Сначала в разделе 1 кратко приведен формализм для описания скалярных астигматических декартовых пучков Куммера. Этот формализм затем обобщается и позволяет описывать векторные декартовы пучки (ТМ моды). Затем, в разделе 2, обсуждаются поляризационные и энергетические характеристики векторных ТМ пучков Куммера. Проведено графическое моделирование интенсивности и поперечных потоков энергии. Выполнен анализ полученных результатов, который подтвердил и проиллюстрировал аналитические расчеты. В заключении кратко изложены основные полученные результаты.

1 Векторные астигматические пучки Куммера с неоднородной поляризацией

Скалярное параболическое уравнение после перехода к безразмерным переменным $X = x / x_0$, $Y = y / x_0$, $Z = z / z_0$, где $x_0 > 0$, $z_0 = k x_0^2 / 2$ – характерные линейные размеры пучка в поперечном и продольном направлениях соответственно, имеет вид

$$(\partial^2_{X,X}+\partial^2_{Y,Y}+4i\,\partial_Z)f=0. \qquad (1.1)$$

Одним из его решений для амплитуд монохроматических волн, согласно [4], является амплитуда $f=f_1f_2f_3$, $(f_3=f_{31}f_{32})$, представляющая собой произведение двух независимых амплитуд для 2D пучков f_1f_{31} и f_2f_{32} для 2D пучков, описывающих скалярные декартовы пучки Куммера в плоскостях (*X*, *Z*) и (*Y*, *Z*) соответственно. Амплитуду f_1 обобщённого 2D светового пучка Куммера в плоскости (*X*, *Z*) можно записать как сумму четного и нечетного решения в виде $f_1=f_{1o}+f_{1e}$, где

$$f_{1e}=M\left(\frac{v_1}{2},\frac{1}{2},t_1X^2\right),$$

$$f_{1o}=\sqrt{t_1}X\,M\left(\frac{1-v_1}{2},\frac{3}{2},t_1X^2\right). \qquad (1.2)$$

Согласующие коэффициенты $f_{31}=\left(\dfrac{Q_1(Z)}{Q_1(0)}\right)^{\frac{v_1}{2}}$, $t_1=\dfrac{i}{Q_1}$ зависят только от *Z*. Выше введен стандартный комплексный параметр пучка $Q_1(Z)=Z-Q_{10}$, где свободный комплексный параметр $Q_{10}=Q'_{10}+iQ''_{10}$; $i=\sqrt{-1}$. Постоянная разделения переменных в уравнении (1.1) $v_1=v'_1+i\,v''_1$ является, в общем случае, также свободным постоянным комплексным параметром.

Функции *f* не зависят явно от гауссиана. Все переменные и параметры здесь и далее записаны в безразмерной форме. Индексы *o* и *e* помечают соответственно четность и нечетность функций f_o и f_e относительно изменения знака аргумента *X*. В плоскости (*Y*, *Z*) решения аналогичные, получаются заменами индекса 1 на индекс 2. Например,

$$Q_2(Z)=Z-Q_{20};\quad f_{2e}=M\left(\frac{v_2}{2},\frac{1}{2},t_2Y^2\right)\left(\frac{Q_2(Z)}{Q_2(0)}\right)^{\frac{v_2}{2}};$$

$$f_{32}=\left(\frac{Q_2(Z)}{Q_2(0)}\right)^{\frac{v_1}{2}};\quad t_2=\frac{i}{Q_2}.$$

Возможны [4], [5] четыре типа скалярных декартовых пучков Куммера: $f_{jk}=f_{1j}f_{2k}f_3$, где индексы *j* и *k* принимают два значения *o* и *e*. В общем случае, полная амплитуда *f* скалярного пучка Куммера зависит от трех координат и четырех свободных комплексных параметров Q_{10}, Q_{20}, v_1, v_2.

Перейдем теперь к изучению векторных ТМ пучков Куммера. Векторы электрического и магнитного полей обобщенной ТМ-моды параксиальной световой волны можно представить [9], [10], как

$$\mathbf{E}=\nabla_\perp f+4\theta\mathbf{e}_Z\partial_Z f;\quad \mathbf{H}=n[\mathbf{e}_Z,\nabla_\perp f].$$

Безразмерный параметр параксиальности $\theta=1/(kx_0)$, $\theta\ll 1$. Вычисляя, получаем в декартовом базисе

$$\mathbf{E}=\mathbf{e}_XE_X+E_Y\mathbf{e}_Y+E_Y\mathbf{e}_Z;\quad \mathbf{H}=n(E_X\mathbf{e}_Y-E_Y\mathbf{e}_X).$$

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

Итак, видно, что возможны 4 типа ТМ мод Куммера, выражающиеся через $f_{1e}, f_{1o}, f_{2e}, f_{2o}$, f_3, которые будем обозначать, как $\mathbf{E}_{ee}, \mathbf{E}_{eo}$, $\mathbf{E}_{oe}, \mathbf{E}_{oo}$. Поперечная часть вектора ***E*** для разных типов мод $\mathbf{E}_{\perp jk}=\nabla_{\perp jk}(f_{1j}f_{2k})$. Теперь, например, $\mathbf{E}_{1jk}=(\partial_1 f_{1j})f_{2k}$. Явные выражения для производных функций f_1, необходимые для дальнейших расчетов:

$$f_{1eX}\equiv\partial_X f_{1e}=-2t_1v_1X\,M\left(1-\frac{v_2}{2},\frac{3}{2},t_1X^2\right);$$

$$f_{1oX}\equiv\partial_X f_{1o}=$$

$$=\frac{f_{1o}}{X}+\frac{2t_1^{3/2}(1-v_1)X^2}{3}M\left(\frac{3-v_1}{2},\frac{3}{2},t_1X^2\right); \qquad (1.3)$$

$$f_{1eZ}\equiv\partial_Z f_{1e}=\frac{v_Xf_{1e}-X\partial_X f_{1e}}{2Q_1};$$

$$f_{1oZ}\equiv\partial_Z f_{1o}=\frac{v_1f_{1o}-X\,f_{1oX}}{2Q_1}.$$

Интересно, что производные f_{1Z} выражаются через f_{1X}, причем для пучков *o* и *e* типов одинаковым образом.

Теперь полный вектор электрического поля декартовых ТМ мод Куммера принимает одинаковый вид для любых индексов *o* и *e*.

$$E_X=f_{1X}\,f_Y\,f_3;\quad E_Y=f_{2Y}\,f_1\,f_3;$$

$$E_Z=2\theta\left(\frac{v_1f_1-X\,f_{1X}}{Q_X}f_2+\frac{v_2f_2-Y\,f_{2Y}}{Q_2}f_1\right)f_3. \qquad (1.4)$$

Для физически реализуемых пучков конечной мощности должна выполняться квадратичная интегрируемость (КИ) функции $\mathbf{E}_\perp$. Анализ показал, что для компонент в плоскости (*X*, *Z*) необходимое условие КИ $Q''_{10}>0$. Если $v'_1>0$, то функция $|f|\to\infty$ при $|X|\to\infty$ и пучок – не КИ. Если $v'_1=0$, то при $|X|\to\infty$ $|f|\to\mathrm{const}$ и пучок – не КИ. Если же $v'_1\in[-1.2,0)$, то $|f|\to 0$ при $|X|\to\infty$, но пучок снова – не КИ. Если, наконец, $v'_1<-1/2$, то $|f|\to 0$ и пучок является КИ. В плоскости (*Y*, *Z*) условия КИ аналогичны. Таким образом, условия КИ для ТМ декартовых мод Куммера такие же, как и для скалярных астигматических пучков Куммера. При этом во всех случаях параметры Q'_{10}, Q'_{20}, v''_X, v''_Y качественно не влияют на КИ, хотя количественно изменяют форму поверхности интенсивности пучка.

Итак, для векторных 3D декартовых астигматических параксиальных пучков Куммера конечные условия физической реализуемости следующие:

$$\{Q''_{10}>0,\, Q''_{20}>0,\, \nu'_1<-1/2,\, \nu'_2<-1/2\}. \qquad (1.5)$$

2 Поляризационные и энергетические характеристики векторных декартовых ТМ-мод Куммера

Для вычисления параметров поляризации ТМ пучков Куммера проще всего ввести, согласно Фёдорову [11], 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 Куммера в сечении пучка в общем случае эллиптическая, зависит от координат *X*, *Y*, Z.

Плотности энергии *w*, продольного S_z и поперечного $\mathbf{S}_\perp$ потоков энергии электромагнитного поля для параксиальных векторных пучков с неоднородной поляризацией (ТМ моды) соответственно равны [7], [9], [10]:

$$w=\frac{\varepsilon\left(\left|E_X\right|^2+\left|E_Y\right|^2\right)}{8\pi};\quad S_z=\frac{c}{n}w;$$

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_\perp&=-\frac{c\varepsilon}{8\pi n}\cdot\mathrm{Re}\left(\mathbf{E}_\perp^*E_Z\right)=\\&=-\frac{c\varepsilon}{8\pi n}\cdot\mathrm{Re}\left(\mathbf{e}_X E_X^*E_Z+\mathbf{e}_Y E_Y^*E_Z\right).\end{aligned}\qquad (2.1)$$

В последнем выражении целесообразно выделить явно, следуя Бекшаеву [12], плотность орбитального $\mathbf{S}_o$ и спинового $\mathbf{S}_s$ потоков энергии. Получаем $\mathbf{S}_\perp=\mathbf{S}_o+\mathbf{S}_s$, где

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_o=\frac{c\varepsilon\theta}{8\pi n}\mathrm{Im}\Big(&\mathbf{e}_X\left(E_X^*\cdot\partial_X E_X+E_Y^*\cdot\partial_X E_Y\right)+\\&+\mathbf{e}_Y\left(E_X^*\cdot\partial_Y E_X+E_Y^*\cdot\partial_Y E_Y\right)\Big),\end{aligned}\qquad (2.2)$$

$$\mathbf{S}_s=\frac{c\varepsilon\theta}{8\pi n}\left(\mathbf{e}_X\partial_Y-\mathbf{e}_Y\partial_X\right)\mathrm{Im}\left(E_X^*E_Y\right). \qquad (2.3)$$

Видим, что $\left|\mathbf{S}_\perp\right|/\left|S_z\right|\sim\theta<<1$, что естественно для параксиальных пучков.

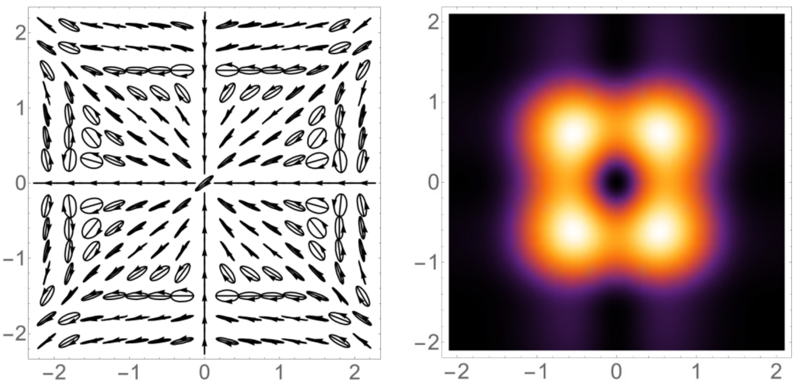
Некоторые результаты графического моделирования поперечных потоков энергии и интенсивности ТМ мод параксиальных пучков Куммера изображены в относительных единицах на рисунках 2.1–2.6 при различных значениях свободных параметров. На всех рисунках взяты одинаковые значения следующих свободных параметров: $Z=0,3$; $Q''_{10}=0,3$; $\nu''_1=0,4$; $\nu''_2=0,4$.

Чтобы обеспечить КИ функций векторной амплитуды пучков Куммера и, тем самым, переносимую конечную мощность через поперечное сечение пучка, выбирались параметры, удовлетворяющие условиям (1.5).

Картины общей интенсивности содержат от двух и более пиков интенсивности. Поляризация ТМ мод Куммера является сильно неоднородной по поперечному сечению пучка и, в общем случае, эллиптической. При изменениях расстояния от оси пучка поляризация постепенно видоизменяется от линейной через круговую снова к линейной. Вдоль осей координат OX и OY поляризация всегда строго линейная. При $Z=0$ поляризация всегда линейная неоднородная по всему сечению пучка.

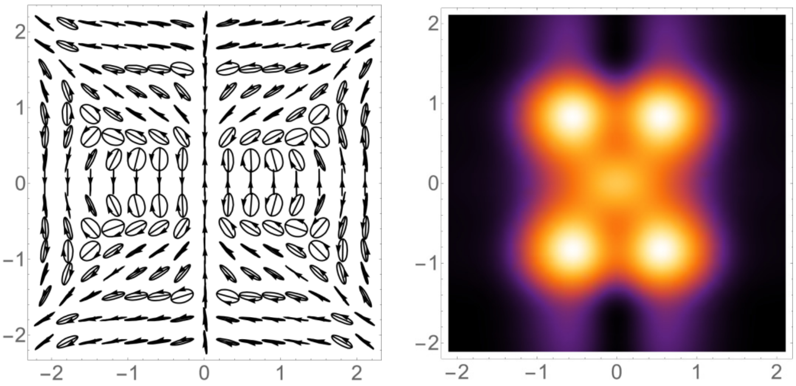
На рисунках 2.2–2.6 показаны некоторые характерные картины интенсивностей в относительных единицах и направлений поперечных потоков энергии $\mathbf{S}_\perp$ для ТМ мод Куммера. Качественно картины интенсивности поперечных потоков энергии и картины полной интенсивности пучка различаются. Например, как ясно видно на рисунках 2.2–2.6, их максимумы различны.

На всех рисунках видно, что плоскости *XZ* и *YZ* являются плоскостями симметрии. Видно, что для картин интенсивности, эллипсов поляризации и потоков энергии точечная группа симметрии соответствующих картин всегда одна и та же: $m_X m_Y 2_z$.



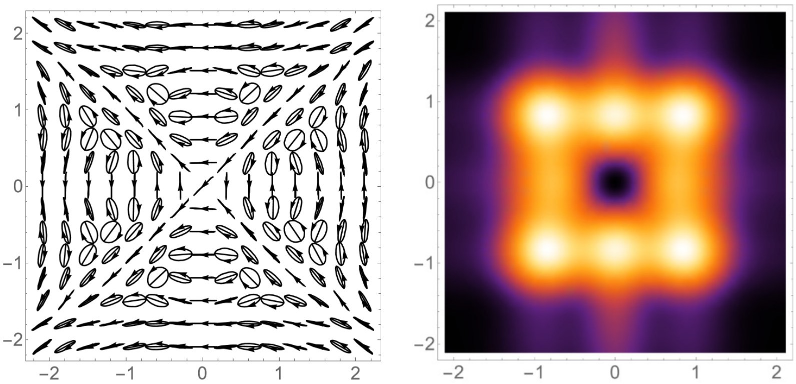
а) *б*)

Рисунок 2.1 – Эллипсы поляризации (*а*) и интенсивность (*б*) ТМ-ее моды декартового пучка Куммера. Свободные параметры: $Q''_{20}=0,2$; $\nu'_1=-0,9$; $\nu'_2=-0,6$



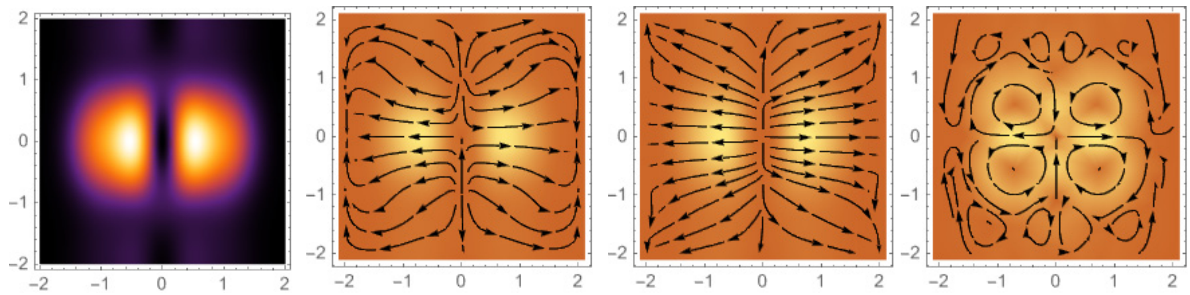
а) *б*)

Рисунок 2.2 – Эллипсы поляризации (*а*) и интенсивность (*б*) ТМ-ео моды декартового пучка Куммера. Свободные параметры: $Q''_{20} = 0,2$; $v'_1 = -0,9$; $v'_2 = -0,6$



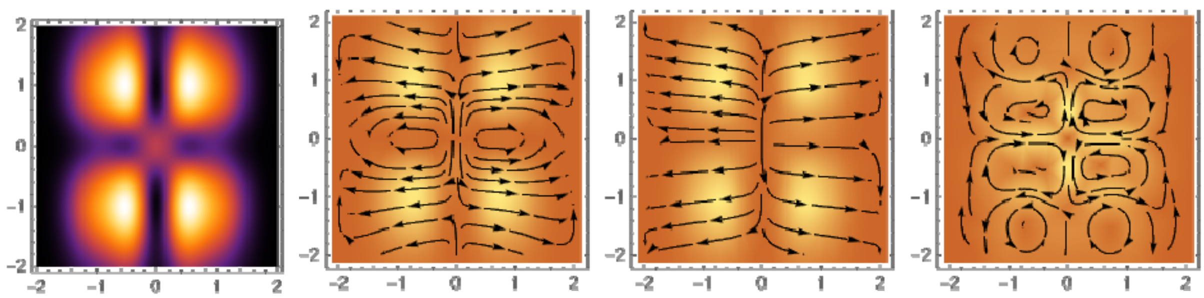
а) *б*)

Рисунок 2.3 – Эллипсы поляризации (*а*) и интенсивность (*б*) ТМ-оо моды декартового пучка Куммера. Свободные параметры: $Q''_{20} = 0,2$; $v'_1 = -0,9$; $v'_2 = -0,6$



а) *б*) *в*) *г*)

Рисунок 2.4 – Интенсивность (*а*), общий поперечный – (*б*), орбитальный – (*в*) и спиновый – (*г*) потоки энергии векторных пучков ТМ-ее моды декартового пучка Куммера. Свободные параметры: $Q''_{20} = 1,6$; $v'_1 = -1,98$; $v'_2 = -1,68$



а) *б*) *в*) *г*)

Рисунок 2.5 – Интенсивность (*а*), общий поперечный – (*б*), орбитальный – (*в*) и спиновый – (*г*) потоки энергии векторных пучков ТМ-ее моды декартового пучка Куммера. Свободные параметры: $Q''_{20} = 1,6$; $v'_1 = -1,98$; $v'_2 = -1,68$

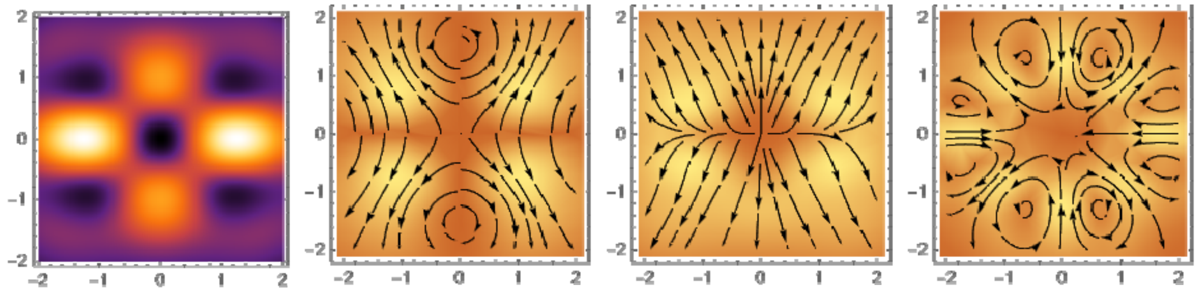


Рисунок 2.6 – Интенсивность (*а*), общий поперечный – (*б*), орбитальный – (*в*) и спиновый – (*г*) потоки энергии векторных пучков ТМ-ее моды декартового пучка Куммера.
Свободные параметры: $Q''_{20} = 1,6$; $\nu'_1 = -1,98$; $\nu'_2 = -1.68$

Графическое моделирование показало, что изменение отличных от нуля свободных параметров ν'_1, ν'_2, Q''_{0Y}, Q''_{0X} сильно влияет на поляризационные и энергетические свойства ТМ мод Куммера. В то же время варьирование параметров ν''_1, ν''_2, Q'_{10}, Q'_{20} слабо воздействует на физические свойства ТМ пучков Куммера.

На рисунках 2.4–2.6 изображены линии плотностей орбитального и спинового потоков энергии вместе с их интенсивностями. Видно, что линии орбитальных и спиновых потоков энергии ориентированы самыми разнообразными способами. Отсюда вытекает, что ориентации поперечных потоков декартовых ТМ пучков Куммера и ТМ пучков Куммера [9] и Бесселя – Гаусса [10] с циркулярной симметрией существенно различаются. Интересно, что линии спиновых потоков энергии ТМ пучков Куммера часто образуют замкнутые кривые. Это соответствует общим спиралевидным энергетическим потокам. Максимумы их интенсивностей не совпадают с максимумами общей интенсивности пучка.

Заключение

В данной работе представлены новые решения векторного параболического уравнения, описывающие параксиальные векторные декартовы 3D световые пучки Куммера с неоднородной поляризацией (ТМ-моды). Отмечено, что имеются четыре типа таких пучков, обозначаемые индексами oo, oe, eo, ee. Установлено, что условия физической реализуемости ТМ-мод Куммера всех типов одинаковы и сводятся к ограничениям на комплексные параметры Q_{10}, Q_{20}, ν_1, ν_2, т. е.

$$\{Q''_{10} > 0, Q''_{20} > 0, \nu'_1 < -1/2,\ \nu'_2 < -1/2\}.$$

При этом части свободных параметров Q'_{10}, Q'_{20}, ν''_1, ν''_2 не влияют на выполнение условий КИ. Представлены явные выражения для векторов поля для интенсивности, орбитального, спинового и общего потоков энергии ТМ мод различных типов.

Проведенное графическое моделирование эллипсов поляризации, интенсивности и поперечных потоков энергии (орбитального $\mathbf{S}_o$, спинового $\mathbf{S}_s$ и общего $\mathbf{S}_\perp = \mathbf{S}_o + \mathbf{S}_s$) потоков подтвердило и проиллюстрировало аналитические расчеты.

Наличие нескольких свободных параметров позволяет в широких пределах изменять свойства рассматриваемых ТМ световых пучков Куммера. Это открывает новые 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 / С.С. Гиргель // Проблемы физики, математики и техники. – 2015. – № 3 (24). – С. 7–9.

6. *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.

7. *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.

8. *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.

9. *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.

10. *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.

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

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

Поступила в редакцию 31.08.2023.

Информация об авторах

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

УДК 539.3:621.891 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_22
EDN: THNZPU

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ И АНАЛИЗ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ В СЛОИСТОМ ТЕЛЕ ПРИ ТРЕНИИ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ПОКРЫТИЯ И ОСНОВАНИЯ

В.В. Можаровский[1], **В.А. Кукареко**[2], **С.А. Марьин**[1], **А.В. Кушнеров**[2]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси, Минск*

NUMERICAL CALCULATION AND ANALYSIS OF THE STRESS STATE IN A LAYERED BODY DURING FRICTION, TAKEN INTO ACCOUNT THE CHANGES IN THE ELASTIC MODULES OF THE COATING AND BASE

V.V. Mozharovsky[1], **V.A. Kukareko**[2], **S.A. Marjin**[1], **A.V. Kushnerou**[2]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*The Joint Institute of Mechanical Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk*

Аннотация. Представлены результаты исследований о численном моделировании, с помощью метода конечных элементов, расчета и анализа напряженного состояния в слоистом теле (изотропное упругое покрытие на упругом основании) при взаимодействии цилиндрического индентора с упругим покрытием с учетом трения. Исследование направлено на изучение механизма износостойкости высокохромистых сталей, модифицированных ионами азота при различных температурах.

Ключевые слова: *напряжения*, *покрытия*, *контактное взаимодействие*, *метод конечных элементов*, *трение*.

Для цитирования: *Численный расчет и анализ напряженного состояния в слоистом теле при трении с учетом изменения модулей упругости покрытия и основания* / В.В. Можаровский, В.А. Кукареко, С.А. Марьин, А.В. Кушнеров // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 22–28. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_22. – EDN: THNZPU

Abstract. The results of the studies on numerical modeling, using the finite element method, calculation and analysis of the stress state in a layered body (an isotropic elastic coating on an elastic base) during the interaction of a cylindrical indenter with an elastic coating taking into account friction are presented. The research is aimed at studying the mechanism of wear resistance of high-chromium steels modified with nitrogen ions at different temperatures.

Keywords: *stress*, *coating*, *contact interaction*, *finite element method*, *friction.*

For citation: *Numerical calculation and analysis of the stress state in a layered body during friction, taken into account the changes in the elastic modules of the coating and base* / V.V. Mozharovsky, V.A. Kukareko, S.A. Marjin, A.V. Kushnerou // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 22–28. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_22 (in Russian). – EDN: THNZPU

Введение

В классических моделях изнашивания слоистых тел рассматриваются механизмы пластической деформации и разрушения упрочненных поверхностных слоев, однако при этом не учитываются особенности их сопряжения с подложкой. Вместе с тем уровни напряжений, действующих при трении на границе раздела между упрочненным слоем и основой, могут превышать напряжения текучести материала основания. В результате этого при трении в материале основы, имеющем, как правило, существенно более низкие механические свойства, могут накапливаться пластические сдвиги, способствующие формированию растягивающих напряжений в упрочненном поверхностном слое материала и приводящие к образованию в нем трещин [1]–[3]. В частности, при исследовании износостойкости высокохромистых сталей, модифицированных ионами азота при различных температурах, было показано, что упрочненные слои малой толщины (до 5–6 мкм) не обеспечивают повышения износостойкости стали в условиях трения без смазочного материала [2], [3].

1 Методика эксперимента

В основе построения численного эксперимента, моделирующего расчет напряженно-деформированной трибологической системы «скользящий цилиндрический индентор – упругое изотропное покрытие на упругом основании», лежат натурные экспериментальные исследования, проведенные в ОИМ НАН Беларуси. Экспериментальные исследования проводились на образцах аустенитной стали Х17Н13М2Т с упрочненной ионами азота при температурах 670 и 770 К поверхностью. Микроструктура образца азотированной при 670 К стали представлена на рисунке 1.1. Глубина модифицированного азотом при 670 К слоя составляла 6 мкм (микротвердость 800–850 HV 0,025). После обработки при 770 К глубина азотированного слоя составляла 17–18 мкм, а микротвердость – 1200 HV 0,025. Микротвердость основания / подложки составляла 200 HV 0,025.

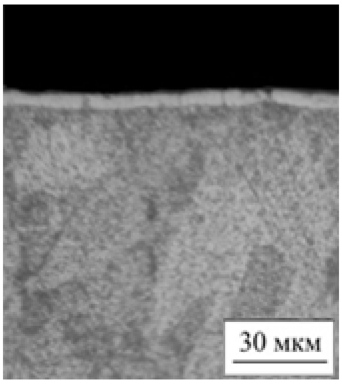


Рисунок 1.1 – Микроструктура стали Х17Н13М2Т, подвергнутой ионно-лучевому азотированию при 670 К, 2 ч

В результате триботехнических испытаний (рисунок 1.2) установлено, что в процессе трения без смазочного материала модифицированной ионами азота при 670 К стали Х17Н13М2Т на начальной стадии испытаний регистрируется малый износ и интенсивность линейного изнашивания упрочненного слоя составляет $I_h \approx 6\text{–}7\cdot10^{-9}$. После износа упрочненного слоя толщиной ≈ 1 мкм и уменьшения толщины оставшегося азотированного слоя до ≈ 5 мкм регистрируется аномально сильное возрастание износа и увеличение I_h до $70\cdot10^{-9}$. В случае испытаний азотированной при 770 К стали Х17Н13М2Т на всем пути трения не регистрируется существенного увеличения интенсивности линейного изнашивания толстого азотированного слоя (рисунок 1.2), составляющей $5\text{–}7\cdot10^{-9}$. Подобные закономерности изнашивания также регистрируются при сухом трении модифицированных ионами азота аустенитных сталей типа 12Х18Н10Т [3] и высокохромистой стали 40Х13 [2]. По данным работ [2], [3] ускоренное изнашивание тонких азотированных слоев является следствием протекания при трении процессов пластической деформации в неупрочненной основе/подложке, что приводит к возникновению растягивающих напряжений в упрочненном поверхностном слое, которые вызывают его ускоренное разрушение в процессе трения. При большой толщине упрочненного слоя (8–20 мкм) нагрузка на пластичную основу при трении незначительна и в ней не протекают акты пластической деформации, что обеспечивает высокую износостойкость слоистого материала. При этом было обнаружено, что модули упругости модифицированных ионами азота слоев могут существенно различаться. В частности, в случае ионной обработки аустенитной высокохромистой стали

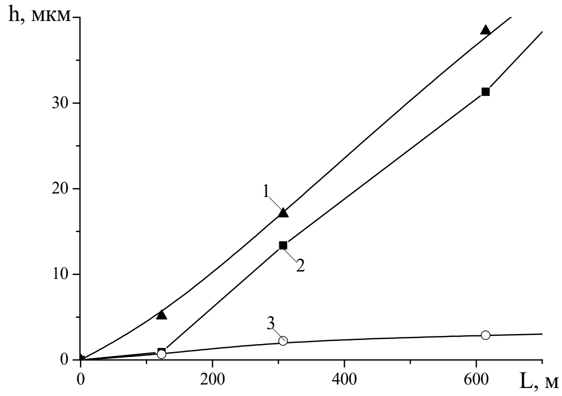


Рисунок 1.2 – Зависимость величины линейного износа h от пути трения L стали Х17Н13М2Т, обработанной ионами азота по различным режимам (трение без смазки; P = 1 МПа), 1 – исходное состояние; 2 – обработка N^+ 670 К; 3 – то же при 770 К

12Х18Н10Т при 670 К значение E поверхностного слоя составляет ≈ 175 ГПа [4], а при высоких температурах азотирования ($\geq$ 770 К) $E \approx 360$ ГПа, при этом модуль упругости стальной подложки (основы) составлял E =200 ГПа. Можно полагать, что различие в значениях модулей упругости азотированного слоя и основы может оказывать существенное влияние как на распределение напряжений в слоистом материале, так и на его износостойкость. При этом экспериментальные данные, полученные в [1]–[3], не позволяют представить полную картину о влиянии значений модулей упругости упрочненного слоя и подложки для различных толщин покрытия на закономерности изнашивания слоистых материалов. Вместе с тем, численные методы дают возможность подробно описать напряженно-деформированное состояние градиентных (слоистых) материалов в зависимости от модулей упругости модифицированного слоя и подложки [5]–[12], что позволит оценить влияние этого фактора на износостойкость материалов. Известно, что на современном этапе развития расчетных методов, многие трибологические системы контактного взаимодействия, а также сложные гетерогенные материалы пар трения, элементы которых содержат упрочненные и функционально-градиентные материалы, рассчитываются с помощью различных численных программ, базирующихся на методах конечных элементов (МКЭ) [5]–[12]. Особенность этих программ состоит в том, что необходимо создавать дискретизацию области, вводить граничные условия, кроме того могут возникать значительные ошибки расчета, если рассматриваемая область достаточно мала (в сравнении с сеткой разбиения), а также в областях с большими концентрациями напряжений. Указанные особенности расчетов также касаются упругих тел, взаимодействующих с другими телами, имеющими относительно тонкое покрытие, полученное, например, методами химико-термической обработки, ионного легирования, вакуумно-дугового осаждения. В частности, такое взаимодействие реализуется в процессе трения материалов с покрытиями в триботехнических узлах различных механизмов. Вместе с тем численные методы дают возможность достаточно подробно описать напряженно-деформированное состояние слоистых материалов при трении и прогнозировать закономерности их изнашивания, что является актуальной задачей физического материаловедения.

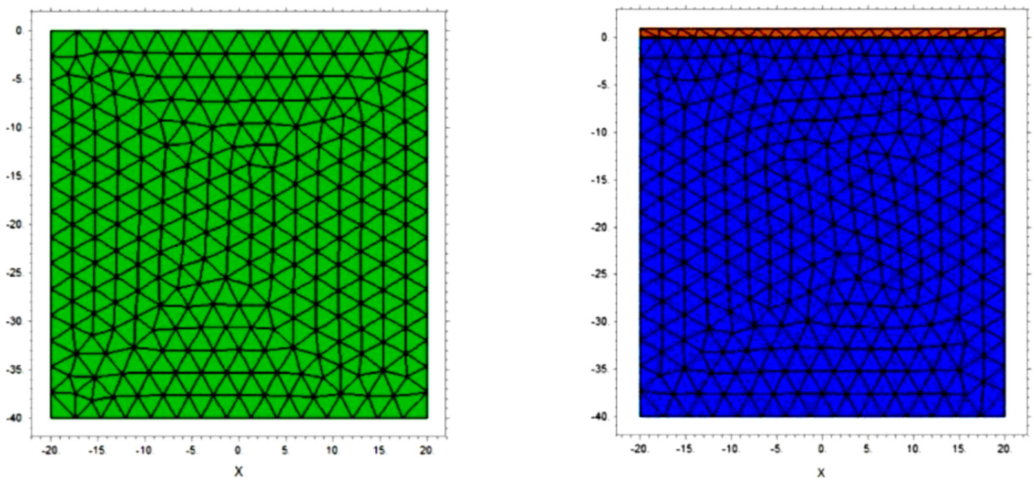
Целью настоящей работы является моделирование методом конечных элементов напряженно-деформированного состояния упрочненного слоя (покрытия) и подложки с различными соотношениями значений их модулей упругости для дальнейшего применения разработанной модели к исследованию износостойкости материалов с твердыми слоями. При этом использовалась процедура конечно-элементного моделирования, включающая: дискретизацию (разбивка исследуемой области на элементы); решение системы линейных алгебраических уравнений, получаемых из уравнений равновесия, минимума функционала и др. Анализ распределений напряжений, перемещений, энергии деформирования производился построенной программой МКЭ. В результате расчета получены компоненты напряженного состояния слоя (покрытия) и подложки.

Для реализации *численного эксперимента* рассмотрена задача математического моделирования процесса контактного взаимодействия цилиндрического индентора при трении с определением напряженного состояния в упругом покрытии и в полупространстве с покрытием при действии граничных нормальных и касательных нагрузок в случае плоской деформации и с неодинаковыми значениями модуля упругости для покрытия и для основания. Расчет производился с использованием метода конечных элементов (МКЭ). На рисунке 1.3 приведена схема разбивки исследуемого образца.

В результате численных расчетов было отмечено, что для разных отношений a/h, при отсутствии трения в области контакта, достаточно точно можно описать распределение давления зависимостью $p(x) = p_0\left(a^2 - x^2\right)^k$. Тогда, используя условие равновесия, имеем уравнение для определения зоны контакта:

$$P = p_0 \frac{\Gamma(k+1)\sqrt{\pi}}{\Gamma(k+1/2)(k+1/2)} a^{k+1}$$

(в частности при $k=1$, $P = p_0(4/3)a^3$; при $k = 0,5$; $P = p_0 \dfrac{\pi a^2}{2}$), где Γ – гамма функция, k – параметр, $0.5 \le k \le 1$, p_0 – максимальное давление, P – усилие на единицу длины, действующее на индентор. При расчете предполагается, что в зоне контакта давление от индентора (рисунок 1.4) задано и распределено по параболическому закону:



а) *б*)

Рисунок 1.3 – Схема разбивки исследуемого образца на МКЭ
(*а* – без упрочненного слоя / покрытия, *б* – с упрочненным слоем / покрытием)

$$p(x) = p_0\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right), \quad p_0 = \frac{3P}{4a},$$

p_0 – максимальное давление, P – усилие на единицу длины на индентор. Действие касательных усилий при учете трения в зоне контакта оценивалось в приближении закона Кулона

$$q(x) = f \cdot p(x),$$

где f – коэффициент трения.

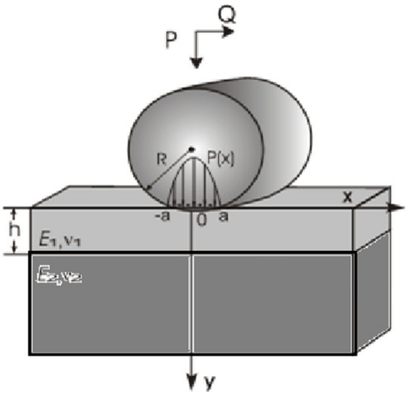


Рисунок 1.4 – Схема цилиндрического индентора, перемещающегося по поверхности слоистого тела и направления действия нормальных $p(x)$ и касательных $q(x)$ усилий в зоне контакта

2 Результаты моделирования

Напряжение в основании/подложке без покрытия. Рассмотрим вначале распределение напряжений в стальном основании без покрытия под действием внешней нагрузки от стального индентора. Согласно теоретическим исследованиям [13] при скольжении цилиндра по поверхности упругого полупространства нормальные и касательные усилия на поверхности изменяются по эллиптическому закону и связаны законом Кулона

$$p(x) = \frac{2P}{\pi a^2}(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}, \quad q(x) = (\pm)\frac{2fP}{\pi a^2}(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Для произвольных законов распределения граничных нагрузок имеем, согласно [13], компоненты тензора напряжений с нормальными $p(x)$ и касательными $q(x)$ усилиями определяются по зависимостям:

$$\sigma_y = \frac{-2y^3}{\pi}\int_{-a}^{a} p(s)\left(\frac{1}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds -$$

$$-\frac{2}{\pi}y^2\int_{-a}^{a} q(s)\left(\frac{x-s}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds,$$

$$\sigma_x = \frac{-2y}{\pi}\int_{-a}^{a} p(s)\left(\frac{(x-s)^2}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds -$$

$$-\frac{2}{\pi}\int_{-a}^{a} q(s)\left(\frac{(x-s)^3}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds,$$

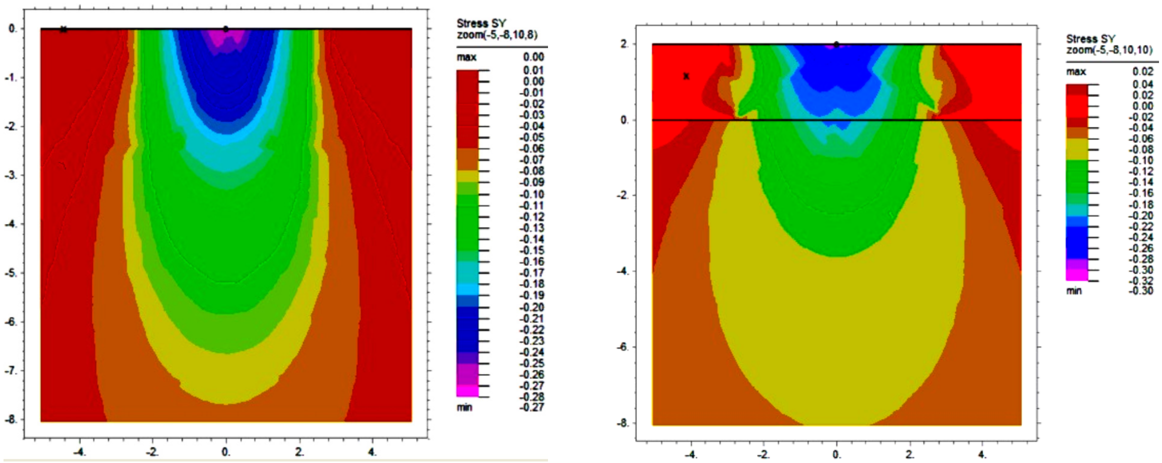
$$\tau_{xy} = \frac{-2y^2}{\pi}\int_{-a}^{a} p(s)\left(\frac{x-s}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds -$$

$$-\frac{2y}{\pi}\int_{-a}^{a} q(s)\left(\frac{(x-s)^2}{\left((x-s)^2 + y^2\right)^2}\right)ds.$$

Напряжение в покрытии и основании / подложке. Формирование на поверхности основания тонкого упрочненного слоя приводит к существенному перераспределению напряжений от внешней нагрузки, как в покрытии, так и в основании. На рисунке 2.1 показана картина изменения напряженного состояния в упругом теле от внешней нагрузки при формировании на его поверхности покрытия, адгезионно связанного с основанием. Расчет напряжений, возникающих под действием внешних нагрузок, проводился для стального основания без покрытия (модуль упругости $E = 2{,}0 \cdot 10^{11}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0{,}31$) и для оснований, на поверхность которого наносилось покрытие ($E = 2{,}83 \cdot 10^{11}$ Па, $\nu = 0{,}31$). Можно видеть, что присутствие на поверхности основы упрочненного слоя приводит к существенному перераспределению напряжений в основании (рисунок 2.1).

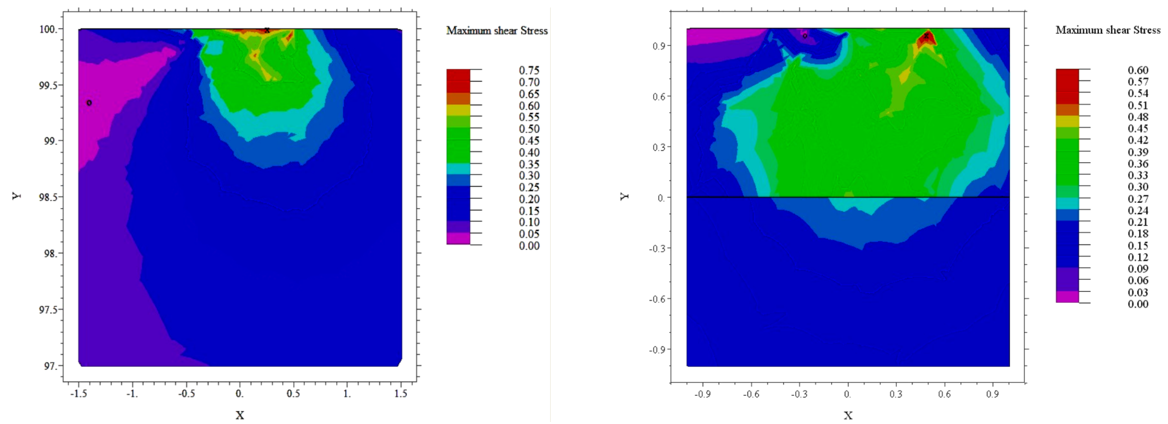
Для приближения результатов моделирования к условиям трения материала с упрочненным слоем, имеющим значение модуля упругости, существенно отличающимся от значения модуля упругости основания, рассматривалась задача о движении индентора по поверхности покрытия с учетом коэффициента трения и для заданной параболической нагрузки. Для наглядного примера о влиянии отношений модулей упругости покрытия и основания на распределение напряжений при трении возьмем $K = E_{\text{пок}} / E_{\text{осн}} = 2{,}2$; 4,4; 13,3, а коэффициент трения индентора по покрытию $f = 0{,}15$, толщина покрытия $h = 1$ мкм, $a = 0{,}5$ мкм. Результаты МКЭ моделирования приведены на рисунке 2.2.

Анализируя данные моделирования, приведенные на рисунке 2.2, можно отметить, что при возрастании K точка максимальных напряжений смещается от поверхности в глубину покрытия, вследствие чего износ покрытия может несколько уменьшаться при больших K. Следует также отметить, что в результате действия касательных усилий на поверхности, даже для однородного материала, возникают разрушающие напряжения, которые зависят от коэффициента трения и располагаются вблизи поверхности (более подробное описание роли трения на изменения картины напряженного состояния в однородном

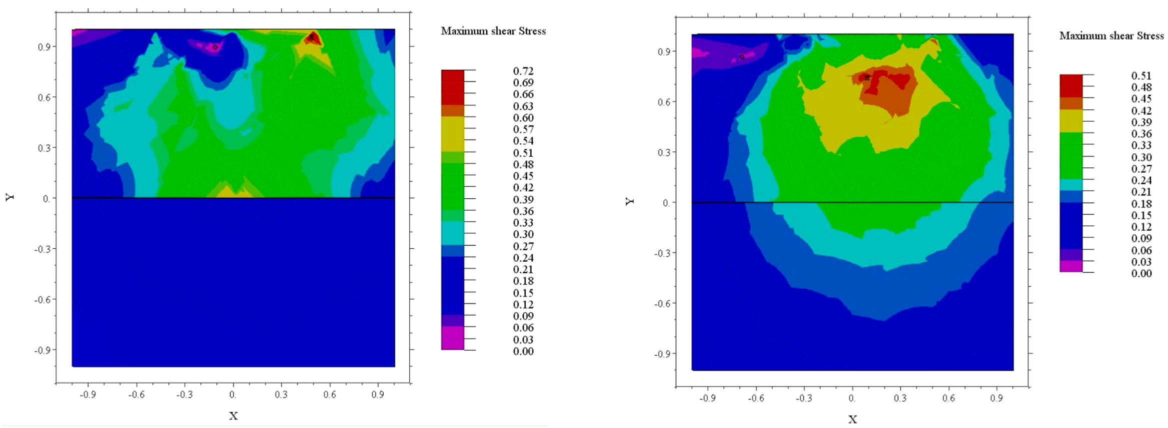


а) *б*)

Рисунок 2.1 – Изменение напряженного состояния σ_y (здесь, *a* = 2,5 мкм, *h* = 2 мкм):
а – в полуплоскости; *б* – в покрытии с основанием



а) *б*)



в) *г*)

Рисунок 2.2 – Распределение полей максимальных напряжений $\tau_{\max}$. Коэффициент трения индентора по покрытию $f = 0{,}15$, толщина покрытия $h = 1$ мкм, $a = 0{,}5$ мкм:
а – без покрытия (модуль упругости $E = 2{,}0 \cdot 10^{11}$ Па);
б – отношение модуля упругости покрытия к модулю упругости основания $E_{\text{пок}} / E_{\text{осн}} = 2{,}2$;
в – $E_{\text{пок}} / E_{\text{осн}} = 4{,}4$; *г* – $E_{\text{пок}} / E_{\text{осн}} = 13{,}3$

теле можно найти в [13]). Например, на рисунке 2.2, *а* показаны максимальные напряжения для однородной полуплоскости. На рисунке 2.3 показано перемещение точки (y_m) расположения максимальных сдвиговых напряжений по глубине покрытия. Для относительно толстых покрытий зона максимальных сдвиговых напряжений $\tau_{\max}$ может находиться внутри покрытия или смещаться на границу раздела покрытия с основанием, а для более тонких покрытий – располагаться внутри основания. Смещение зоны максимальных напряжений при трении в глубину покрытия, имеющего высокий уровень значений модуля упругости, либо в основание, может привести к формированию в нем значительных сдвиговых напряжений, которые будут способствовать протеканию актов пластической деформации в основании и к появлению растягивающих напряжений в упрочненном слое [1]–[3]. Последнее, в свою очередь, приведет к ускоренному растрескиванию упрочненного слоя при трении.

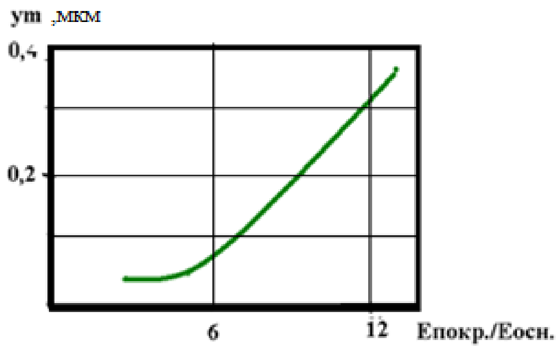


Рисунок 2.3 – Изменение расположения точки y_m максимальных напряжений $\tau_{\max}$ по глубине слоя в зависимости от отношения модулей упругости покрытия и основания

Таким образом, можно заключить, что формирование на поверхности материалов упрочненных слоев с более высоким значением модуля упругости по сравнению с модулем упругости основания будет приводить к смещению зоны максимальных напряжений при трении в глубину упрочненного слоя (и в основание), что может способствовать пластификации основания и появлению дополнительных растягивающих напряжений в упрочненном слое, приводящих к его ускоренному разрушению [2], [3].

Заключение

С помощью метода конечных элементов исследовано напряженно-деформированное состояние покрытия и подложки при контакте с цилиндрическим индентором при трении. Установлено, что по мере увеличения отношения модуля упругости покрытия к модулю упругости основания точка максимальных напряжений смещается в глубину покрытия. При этом может регистрироваться некоторое увеличение износостойкости покрытия, имеющего большую толщину по сравнению с зоной контакта. При уменьшении толщины покрытия различие в модулях упругости покрытия и основания может, напротив, приводить к ускоренному разрушению упрочненного слоя при трении вследствие пластической деформации основы. Разработанные модели будут применяться к исследованию износостойкости материалов с твердыми слоями.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Белый*, *А.В.* Сдвиговая пластическая деформация и износостойкость ионно-модифицированных материалов с твердыми слоями / А.В. Белый, В.А. Кукареко, В.Е. Рубцов, А.В. Колубаев // Физическая мезомеханика. – 2002. – Т. 5, № 1. – С. 41–47.

2. *Износостойкость в условиях трения без смазочного материала ионно-азотированной стали* 40Х13 / В.А. Кукареко, А.В. Кушнеров, И.Ю. Тарасевич, В.В. Можаровский // Актуальные вопросы машиноведения: Сб. научных трудов / редколлегия С.Н. Поддубко (гл. ред.) [и др.]. – Минск: ОИМ НАН Беларуси, 2021. – Вып. 10. – С. 302–306.

3. *Закономерности изнашивания упрочненной ионами азота аустенитной стали* 12Х18Н10Т / В.А. Кукареко, В.В. Можаровский, А.В. Кушнеров, С.А. Марьин // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 4 (45). – С. 37–43.

4. *Chen*, *J-S.* Phase stability, magnetism, elastic properties and hardness of binary iron nitrides from first principles / J-S. Chen, C. Yu, H. Lu // Journal of Alloys and Compounds. – 2014. – Vol. 625. – P. 224–230.

5. *Можаровский*, *В.В.* Прикладная механика слоистых тел из композитов / В.В. Можаровский, В.Е. Старжинский. – Минск: Наука, 1988. – 280 с.

6. *Можаровский*, *В.В.* Исследование напряженного состояния волокнистого композиционного материала с однородным покрытием при контакте с цилиндрическим индентором / В.В. Можаровский, Н.А. Рогачева // Материалы, технологии, инструменты. – 2000. – № 2. – С. 5–10.

7. *Можаровский*, *В.В.* Анализ механико-математических моделей расчета функционально-градиентных материалов, работающих в условиях контактного взаимодействия / В.В. Можаровский, Е.М. Березовская // Материалы, технологии, инструменты. – 2013. – № 3. – С. 14–21.

8. *Гупта, П.К.* Контактная задача для слоя / П.К. Гупта, Ж.А. Валовит, Е.Ф. Финкин // Проблемы трения и смазки. – 1973. – № 4. – С. 61–67.

9. *Modeling and determination of thermostressed state of a closed cylindrical shell made of fragile material under selected heating conditions* /

M. Hachkevych, O. Humenchuk, V. Mozharovs'kyi, B. Chornyi // Międzynarodowe seminarium naukowe optymalizacja struktur procesów wytwórczych 21, Opole, grudnia 2021. – Poland 2021. – С. 51.

10. *Применение математических методов к расчету контактного взаимодействия упругих тел из композитов* / В.В. Можаровский, Д.С. Кузьменков, И.И. Коляскин, Ю.В. Василевич, С.В. Киргинцева // Математические методы в технике и технологиях ММТТ-34: Международная научная конференция, Минск, 25 октября 2021 г. / Белорусский национальный технический университет. – Минск, 2021. – С. 10–11.

11. *Применение математических методов к расчету контактного взаимодействия упругих тел из композитов* / В.В. Можаровский, Д.С. Кузьменков, И.И. Коляскин, Ю.В. Василевич, С.В. Киргинцева // Математические методы в технике и технологиях. – 2021. – № 11. – С. 7–10.

12. *Можаровський*, *В.В.* Реалізація математичних моделей визначення температури для шару на пружному півпросторі / В. Можаровський, В. Кукареко, О. Кушнеров // Сучасні проблеми термомеханіки: сб. Міжнар. наук. конф. 15–17 вересня 2021 р., Львів, Україна. 2021. – С. 129–130.

13. *Джонсон*, *К.* Механика контактного взаимодействия / К. Джонсон. – Москва: Наука, 1989. – 410 с.

Поступила в редакцию 28.01.2024.

Информация об авторах

Можаровский Валентин Васильевич – д.т.н., профессор
Кукареко Владимир Аркадьевич – д.ф.-м.н., профессор
Марьин Сергей Александрович – к.т.н.
Кушнеров Андрей Викторович – научный сотрудник

УДК 539.3;621.382
DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_29
EDN: SWGRMA

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ДВУЛУЧЕВОГО ЛАЗЕРНОГО РАСКАЛЫВАНИЯ СТЕКЛОИЗДЕЛИЙ ТРУБЧАТОЙ ФОРМЫ

Ю.В. Никитюк[1], В.А. Емельянов[2], Е.Б. Шершнев[1], Ц. Ма[3], Л. Ван[3], И.Ю. Аушев[4]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*ОАО «Интеграл», Минск*
[3]*Нанкинский университет науки и технологий*
[4]*Университет гражданской защиты, Минск*

OPTIMIZATION OF PARAMETERS FOR DOUBLE-BEAM LASER CLEAVING OF TUBULAR-SHAPED GLASS PRODUCTS

Yu.V. Nikityuk[1], V.A. Emelyanov[2], E.B. Shershnev[1], J. Ma[3], L. Wang[3], I.Yu. Aushev[4]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*JSC "INTEGRAL", Minsk*
[3]*Nanjing University of Science and Technology*
[4]*University of Civil Protection of the Ministry for Emergency Situations of the Republic of Belarus, Minsk*

Аннотация. При помощи конечно-элементных расчетов получены регрессионные и нейросетевые модели процесса двулучевого лазерного раскалывания стеклоизделий трубчатой формы. С использованием центрального композиционного плана проведен соответствующий численный эксперимент, в котором скорость вращения стеклянной трубки, геометрические параметры эллиптического лазерного пучка с длиной волны 10,6 мкм и мощности лазерных пучков с длинами волн 10,6 мкм и 1,06 мкм использовались в качестве варьируемых факторов. При этом значения максимальных температур и максимальных термоупругих напряжений растяжения в зоне двулучевой обработки стеклянных трубок определялись в качестве откликов в рамках конечно-элементного моделирования с использованием языка программирования APDL. При помощи библиотеки для машинного обучения TensorFlow выявлены эффективные архитектуры искусственных нейронных сетей для определения максимальных температур и максимальных термоупругих напряжений в зоне лазерной обработки. Проведено сравнение нейросетевых и регрессионных моделей. С использованием генетического алгоритма MOGA проведена многокритериальная оптимизация параметров двулучевого лазерного раскалывания стеклоизделий трубчатой формы.

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

Для цитирования: *Оптимизация параметров двулучевого лазерного раскалывания стеклоизделий трубчатой формы* / Ю.В. Никитюк, В.А. Емельянов, Е.Б. Шершнев, Ц. Ма, Л. Ван, И.Ю. Аушев // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 29–35. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_29. – EDN: SWGRMA

Abstract. This study used finite-element calculations to develop regression and neural network models for the double-beam laser cleaving process of tubular-shaped glass products. A numerical experiment was performed using the central composite design, where the rotation speed of the glass tube, the geometric parameters of an elliptical laser beam with a wavelength of 10.6 μm, and the powers of laser beams with wavelengths of 10.6 μm and 1.06 μm were used as variable factors. The maximum temperatures and maximum thermoelastic tensile stresses in the zone of double-beam processing of glass tubes were determined as responses using finite element modelling with APDL (Ansys Parametric Design Language). The effective architectures for artificial neural networks have been established with TensorFlow in order to determine the maximum temperatures and thermoelastic stresses in the laser-treated area. The comparative analysis of neural network and regression models was carried out. A multi-criteria optimization of the parameters of double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products was performed using MOGA (multi-objective genetic algorithm).

Keywords: *laser cutting*, *crack*, *ANN*, *MOGA*, *ANSYS*.

For citation: *Optimization of parameters for double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products* / Yu.V. Nikityuk, V.A. Emelyanov, E.B. Shershnev, J. Ma, L. Wang, I.Yu. Aushev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 29–35. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_29 (in Russian). – EDN: SWGRMA

Introduction

Silicate glasses possess qualities that make them very suitable for industrial applications, with cutting being the main technique involved in the creation of glass products. Laser cleaving technology offers several notable advantages when compared to conventional cutting methods. The advancement of laser cleaving technology occurred in the latter part of the twentieth century. However, even now, the investigation of laser cleaving methods for separating different brittle non-metallic materials remains significant [1]–[4].

Laser cleaving of tubular-shaped glass products is a highly practical and significant technology.

The initial findings about the cleaving method for laser cutting of glass tubes are outlined in [2]. The exceptional effectiveness of double-beam techniques in cutting plane-parallel samples using laser cleaving methods served as the foundation for developing double-beam variations of laser cleaving for tubular-shaped glass products [5]–[8].

Metamodels are a reasonable choice when optimizing the parameters of laser cleaving for brittle nonmetallic materials. Metamodeling enables the identification of laser processing output parameters by employing regression and neural network models, eliminating the need for extensive calculations. Simultaneously, using genetic algorithms in metamodeling allows for the determination of the optimal values for laser cleaving parameters [9]–[15].

This study investigates the process of double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products using finite-element, regression and neural network models, and determines the effective parameters of laser-induced crack formation via MOGA (multi-objective genetic algorithm).

1 Determination of optimal parameters for double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products

Figure 1.1 depicts the schematic of a double-beam laser cleaving process used for tubular-shaped glass products. Position 1 relates to the CO_2 laser, position 2 corresponds to the refrigerant supply nozzle, and position 3 refers to the YAG laser.

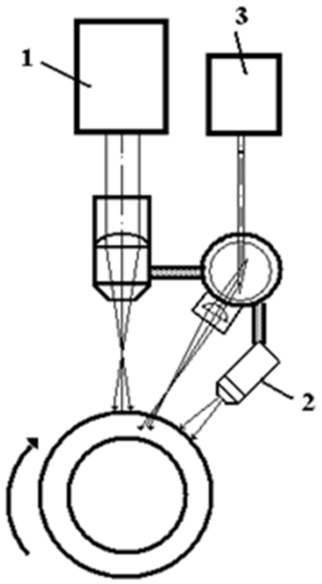


Figure 1.1 – Schematic of double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products

During the modelling process, it was taken into account that the tubular-shaped glass product is heated by laser radiation over several revolutions, while the tube surface is concurrently cooled by an air-water mixture at a certain distance from the laser heating zones.

The temperatures and thermoelastic stresses generated in tubular-shaped glass products during double-beam laser cleaving were determined using APDL. The characteristics of silicate glass provided in reference [2] were used in the modelling process. The calculations were conducted for a tube with an outer radius of 5 mm, an inner radius of 4 mm, and a length of 10 mm. The model comprised 4352 Solid 5 elements (see Figure 1.2).

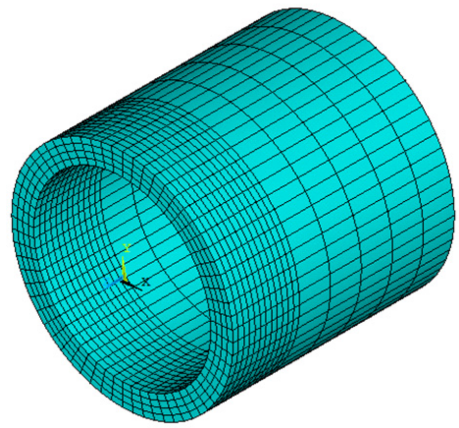


Figure 1.2 – Finite element model

The subsequent parameters were employed for the purpose of modelling: the tube's rotation speed relative to the laser beams was set at 40 revolutions per minute; the laser beam with a radiation wavelength of $\lambda = 10.6$ μm had a radiation power of $P = 5$ W; the major semi-axis of the laser beam was $A = 3\cdot10^{-3}$ m, and the minor semi-axis was $B = 1\cdot10^{-3}$ m; the laser beam with a radiation wavelength of $\lambda = 1.06$ μm had a radiation power of $P_0 = 50$ W; the radiation spot radius was $R = 0.5\cdot10^{-3}$ m.

The calculated values of the temperature fields and the thermoelastic stress fields created in a tubular-shaped glass product during double-beam laser cleaving are depicted in Figures 1.3–1.4.

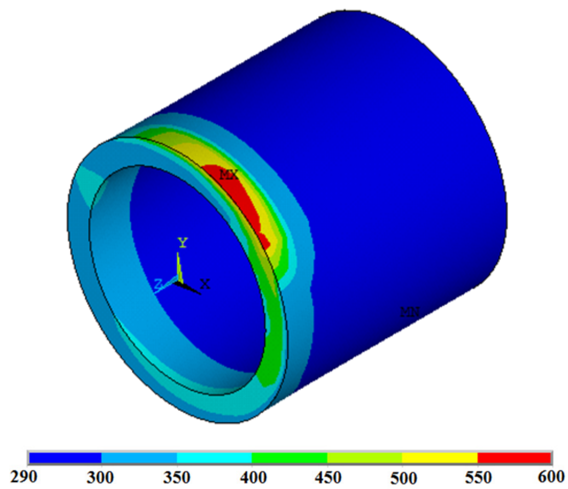


Figure 1.3 – Temperature distribution throughout the sample's volume, °K

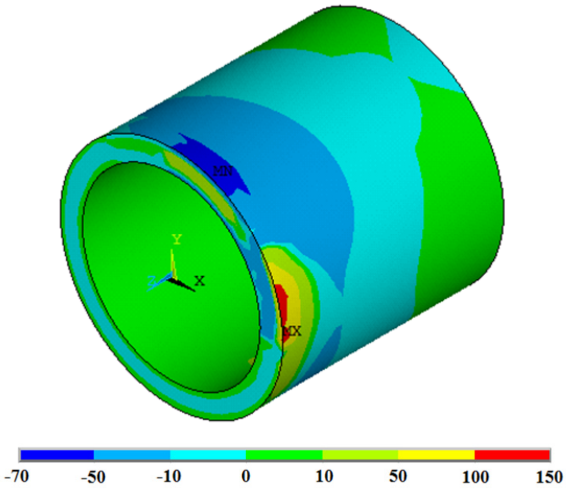


Figure 1.4 – Distribution of stresses σ_{zz} throughout the sample's volume, MPa

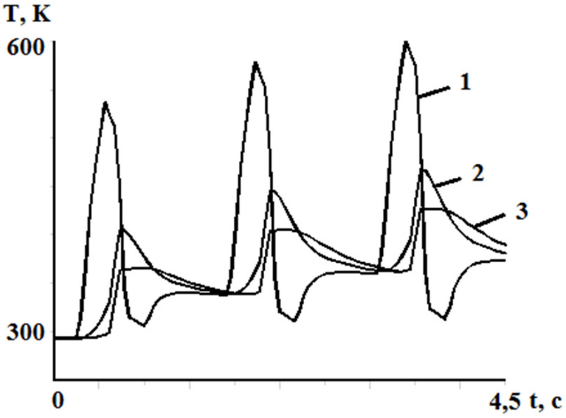


Figure 1.5 – Computed relationships between temperature T and processing time at specific points along the tube

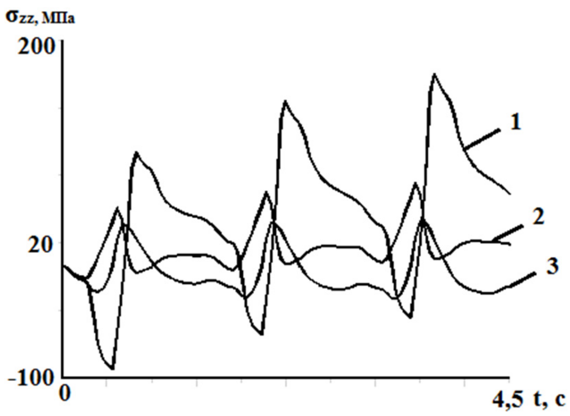


Figure 1.6 – Computed relationships between stresses σ_{zz} and processing time at specific points along the tube

Figures 1.5, 1.6 display the calculated relationships between temperatures and thermoelastic stresses in the axial direction of the tube over time. These relationships are shown at specific points on the cutting plane (1 represents the outer surface of the tube; 2 stands for the middle of the tube wall; 3 indicates the inner surface of the tube). These calculations were made during the process of double-beam cleaving.

The maximum temperatures calculated for the finite element modelling parameters did not surpass the glass transition temperature of the processed material (795 K for C52 glass), which is a prerequisite for the occurrence of laser-induced cracks (see Figures 1.3 and 5) [2].

When a glass tube is subjected to multiple laser heating while rotating around its axis, the temperature at specific points on its surface in the cutting plane experiences periodic sharp increases and decreases due to the refrigerant's impact. Simultaneously, there is a slight increase in the maximum temperatures of the glass and the maximum thermoelastic stresses exerted in the axial direction of the tube with each revolution in relation to the laser radiation sources (see Figures 1.5, 1.6). Furthermore, additional exposure to YAG-laser radiation results in elevated tensile and compressive stresses, hence enhancing the stability of laser-induced crack formation.

2 The numerical experiment

The numerical experiment was carried out using 27 combinations of the face-centered version of the central composite design generated in the DesignXplorer module for five factors (P1-P5): P1 was the rotation speed of the tube ω; P2 was the laser power with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ μm P; P3 was the major semi-axis of the laser beam A with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ μm; P4 was the minor semi-axis of the beam B with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ μm; P5 was the laser power with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ μm P_0. The following responses were determined: maximum temperature T and maximum tensile stresses σ_{zz} in the treatment zone (see Table 2.1).

The response functions relating the output parameters (T, σ_{zz}) to the factors (ω, P, A, B, P_0) take the following form:

$$Y_T = 6.69 - 6.67\cdot10^{-3}\omega + 0.155P - 751B +$$
$$+1.68\cdot10^5 B^2 - 3.68\cdot10^{-4}\omega P + 1.09\omega B - 6.72PA -$$
$$-31.2PB - 2.29\cdot10^{-4}PB_0 + 1.27\cdot10^4 AB +$$
$$+0.106AP_0 + 2.09BP_0,$$
$$T = e^{Y_T} - 1,$$
$$Y_\sigma = -6.74\cdot10^8 - 5.03\cdot10^8\omega P + 2.23\cdot10^9\omega A +$$
$$+1.85\cdot10^5\omega P_0 - 9.4\cdot10^{10}PB - 5.06\cdot10^5 PP_0 +$$
$$+3.44\cdot10^9 BP_0,$$
$$\sigma_{zz} = \left(1.17Y_\sigma + 1\right)^{\frac{1}{1.17}} - 1.$$

Figure 2.1 depicts the assessment of how the input parameters affect the output parameters. Both responses during double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products are significantly influenced by tube rotation speed ω and laser power with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ µm. At the same time, the values of the maximum tensile stresses σ_{zz} are substantially affected by the laser power with radiation wavelength $\lambda = 10.6$ µm.

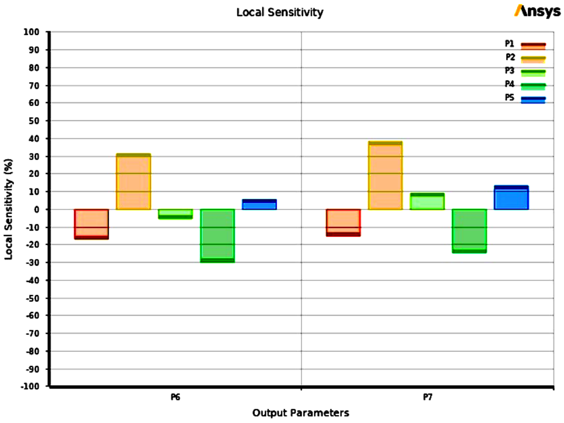


Figure 2.1 – Response sensitivity diagram
$P1 - \omega$, $P2 - P$, $P3 - A$, $P4 - B$, $P5 - P_0$, $P6 - T$, $P7 - \sigma_{zz}$

Figures 2.2, 2.3 show the dependences of maximum temperatures T and maximum tensile stresses σ_{zz} in the treatment zone on the processing parameters.

The construction of artificial neural networks containing two hidden layers (see Figure 2.4) was performed using TensorFlow in accordance with the algorithm outlined in [16].

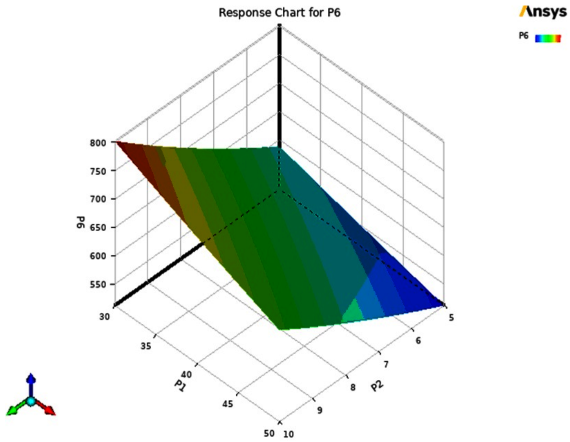


Figure 2.2 – Dependence of maximum temperature T, K on processing parameters $P1 = \omega$,$P2 = P$

The Adam optimizer, ReLU activation function, and MSE loss function were applied in the process of constructing the artificial neural network. The neural network underwent training for a total of 500 epochs. Consequently, 16 artificial neural networks were created with the number of neurons in two hidden layers ranging from 5 to 20, with an interval of 5.

Table 2.1 – Experimental design and calculation results

№	$P1$ ω, rev / min	$P2$ P, W	$P3$ A, m	$P4$ B, m	$P5$ P_0, W	$P6$ T,°K	$P7$ σ_{zz}, MPa
1	40	7.5	0.003	0.0015	65	632	82.1
2	30	7.5	0.003	0.0015	65	690	85.8
3	50	7.5	0.003	0.0015	65	591	76.2
4	40	5	0.003	0.0015	65	551	66.8
5	40	10	0.003	0.0015	65	731	97.5
6	40	7.5	0.002	0.0015	65	651	72.7
7	40	7.5	0.004	0.0015	65	617	84.7
8	40	7.5	0.003	0.001	65	762	93.0
9	40	7.5	0.003	0.002	65	575	71.7
10	40	7.5	0.003	0.0015	50	622	73.8
11	40	7.5	0.003	0.0015	80	652	90.4
12	30	5	0.002	0.001	80	714	76.5
13	50	5	0.002	0.001	50	585	54.7
14	30	10	0.002	0.001	50	1055	124.1
15	50	10	0.002	0.001	80	866	99.3
16	30	5	0.004	0.001	50	632	70.1
17	50	5	0.004	0.001	80	588	80.0
18	30	10	0.004	0.001	80	959	129.2
19	50	10	0.004	0.001	50	785	99.8
20	30	5	0.002	0.002	50	534	48.7
21	50	5	0.002	0.002	80	512	57.8
22	30	10	0.002	0.002	80	737	92.3
23	50	10	0.002	0.002	50	598	60.5
24	30	5	0.004	0.002	80	587	71.2
25	50	5	0.004	0.002	50	462	49.2
26	30	10	0.004	0.002	50	661	89.8
27	50	10	0.004	0.002	80	603	87.5

Table 2.2 – Test dataset

№	*P*1 ω, rev / min	*P*2 *P*, W	*P*3 *A*, m	*P*4 *B*, m	*P*5 P_0, W	*P*6 *T*,°K	*P*7 σ_{zz}, MPa
1	38	8.4	0.003	0.002	54	592	70.8
2	40	9.7	0.002	0.001	68	927	105.8
3	35	7.8	0.003	0.002	51	584	67.4
4	31	7.4	0.002	0.002	72	639	70.1
5	36	9.2	0.004	0.001	60	843	109.4
6	44	8.1	0.003	0.001	68	772	96.7
7	36	8.3	0.004	0.001	61	793	102.6
8	34	6.5	0.004	0.001	77	719	97.2
9	50	5.1	0.003	0.002	72	499	60.5
10	35	7.6	0.003	0.001	60	801	93.4

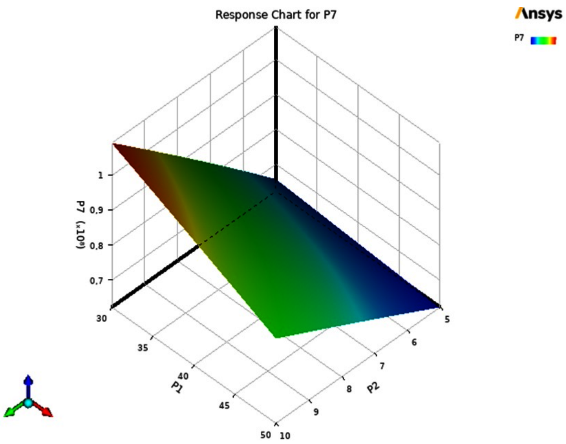


Figure 2.3 – Dependence of maximum stresses σ_{zz}, MPa on processing parameters *P*1 = ω, *P*2 = *P*

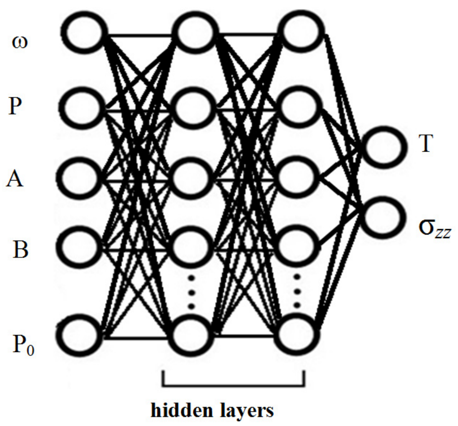


Figure 2.4 – Artificial neural network architecture

The dataset presented in Table 2.2 was used to perform tests on regression and neural network models.

The resulting models were evaluated using mean absolute error (MAE), root mean square error (RMSE), mean absolute percentage error (MAPE), and determination coefficient R^2.

Figures 1.11, 1.12 show heat maps illustrating the distribution of validation errors in determining the maximal values of temperature and tensile stresses during double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products. The number of neurons in the first and second hidden layers of the artificial neural network are shown by the vertical and horizontal axes, respectively. The intensity of color coding represents the extent of error: the error increases from light to dark.

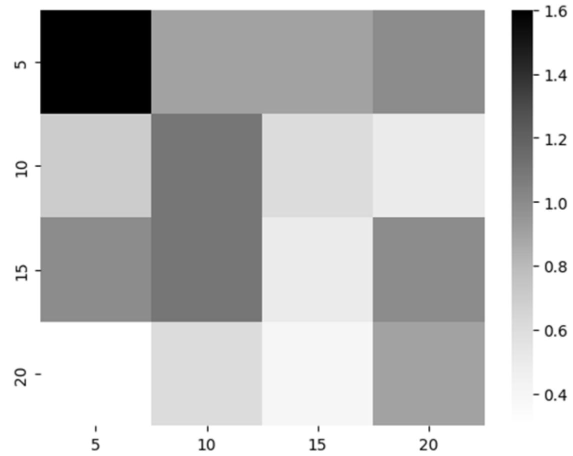


Figure 2.5 – Heat map of MAPE error distribution when determining *T*

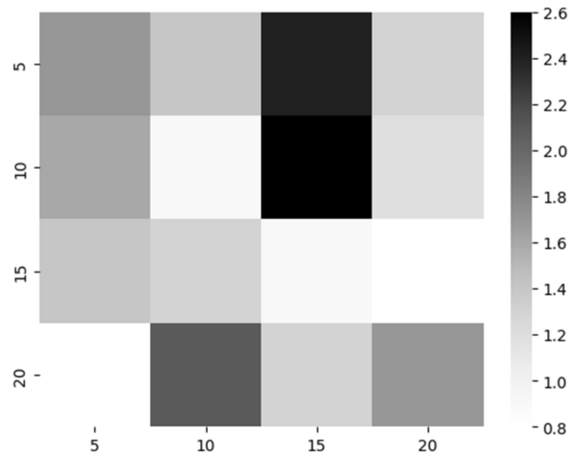


Figure 2.6 – Heat map of MAPE error distribution when determining σ_{zz}

The artificial neural network with the architecture [5-20-5-2] demonstrated the most favorable results when determining the values of maximum temperatures T and the maximum tensile stresses σ_{zz} in the treatment zone.

Table 2.3 displays the estimation outcomes of both the regression and neural network models.

Table 2.3 – Evaluation results of regression and neural network models

Criterion	Regression model		Neural network model	
	T	σ_{zz}	T	σ_{zz}
RMSE	6.4 K	2.78 MPa	2.4 K	0.80 MPa
MAE	5.9 K	2.36 MPa	2.0 K	0.66 MPa
MAPE	0.8 %	2.7 %	0.3 %	0.8%
R^2	0.9975	0.9739	0.9998	0.9993

The evaluation findings of the generated regression and neural network models demonstrate a required consistency with the outcomes obtained from finite element computations. Neural network models exhibit higher efficiency when it comes to predicting the parameters of double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products.

The MOGA algorithm of the DesignXplorer module was used to perform multicriteria optimization of parameters for double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products. The optimization procedures were conducted in accordance with the algorithm outlined in [10].

The following optimization criteria were chosen: $\omega \to \max$, $\sigma_{zz} \to \max$, $T \leq 795$ K. The optimization results are provided in Table 2.4. Parameter values derived using the finite element modeling are presented in brackets. The application of the MOGA algorithm provided the maximum relative error of less than 3% when determining the responses.

Table 2.4 – Optimization results

№	1
*P*1 ω, rev / min	49.8
*P*2 *P*, W	9.9
*P*3 *A*, m	0.004
*P*4 *B*,	0.001
*P*5 P_0, W	79
*P*6 *T*, °K	794 (778)
*P*7 σ_{zz}, MPa	111,7 (115.1)

Conclusion

This study presents the construction of regression and neural network models of double-beam laser cleaving of tubular-shaped glass products and determines the optimal neural network architecture, the accuracy of which was found to be superior to that of the corresponding regression models. The application of the MOGA algorithm in multicriteria optimization has led to the identification of modes for double-beam laser cleaving, which ensure efficient generation of laser-induced cracks in glass tubes.

REFERENCES

1. *Lumley*, *R.M.* Controlled separation of brittle materials using a laser / R.M. Lumley // Am. Ceram. Soc. Bull. – 1969. – Vol. 48. – P. 850–854.

2. *Machulka*, *G.A.* Laser processing of glass / G.A. Machulka. – Moscow: Sov. radio, 1979. – 136 p. (In Russian).

3. *Nisar*, *S.* Laser glass cutting techniques. – A review / S. Nisar // Journal of laser applications. – 2013. – Vol. 25, № 4. – P. 042010-1–11.

4. *Kondratenko*, *V.S.* Precision Cutting of Glass and Other Brittle Materials by Laser-Controlled Thermo-Splitting (Review) / V.S. Kondratenko, S.A. Kudzh // Glass Ceram. 74. – 2017. – P. 75–81. – DOI: https://doi.org/10.1007/s10717-017-9932-1.

5. *Two-beam laser thermal cleavage of brittle nonmetallic materials* / S.V. Shalupaev, E.B. Shershnev, Yu.V. Nikityuk, A.A. Sereda // Journal of Optical Technology. – 2006. – Vol. 73, № 5. – P. 356–359. – DOI: 10.1364/JOT.73.000356.

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. *Nikityuk*, *Yu.V.* Physical regularities of laser thermal cleaving of silicate glasses and alumina ceramics: specialty 01.04.21 “Laser physics”: PhD thesis extended abstract / Nikityuk Yuri Valerievich. – Minsk, 2009. – 24 p. (In Russian).

8. *Shalupaev*, *S.V.* Laser thermal cleaving of tubular-shaped glass products / S.V. Shalupaev, Yu.V. Nikityuk // Problems of Physics, Mathematics and Technology. – 2010. – № 3 (4). – P. 35–40 (In Russian).

9. *Nikityuk*, *Yu.V.* Optimization of parameters for laser cleaving of quartz glass / Yu.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Yu. Aushev // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2021. – № 4 (49). – P. 21–28. – DOI: 10.54341/20778708_ 2021_4_49_21. (In Russian).

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

11. *Nikityuk*, *Yu.V.* Optimization of laser splitting parameters of silicate glasses with elliptical beams in the plane of parallel surface / Yu.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Yu. Aushev // Vestnik of the Sukhoi State Technical University of Gomel. – 2023. – № 3. – P. 17–27.

12. *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.

13. *Nikityuk*, *Y*. Determination of the Parameters of Controlled Laser Thermal Cleavage of Crystalline Silicon Using Regression and Neural Network Models / Y. Nikitjuk, A. Serdyukov // Crystallography Reports. – 2023. – Vol. 68, № 7. – P. 195–200.

14. *Parametric optimization of silicate-glass-based asymmetric two-beam laser splitting* / Yu. Nikityuk, A. Sereda, A. Serdyukov, S. Shalupaev, I. Aushev // Journal of Optical Technology. 2023. – Vol. 90, iss. 6. – P. 296–301. – DOI: https://doi.org/10.1364/JOT.90.000296.

15. *Nikityuk*, *Yu.V*. Optimization of laser cleaving of silicate glasses by elliptical beams under additional influence of hot air flow / Yu.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Yu. Aushev // Proceedings of F. Skorina Gomel State University. – 2023. – № 6 (141). – P. 110–116. (In Russian).

16. *Nikityuk*, *Yu.V*. Determination of the parameters of two-beam laser splitting of silicate glasses using regression and neural network models / Yu.V. Nikityuk, A.N. Serdyukov, I.Yu. Aushev // Journal of the Belarusian State University. Physics. – 2022. – № 1. – P. 35–43. – DOI: https://doi.org/10.33581/2520-2243-2022-1-35-43.

The article was submitted 18.12.2023.

Информация об авторах

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

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

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

Ма Цзюнь – профессор

Ван Лей – доцент

Аушев Игорь Юрьевич – к.т.н., доцент

ФИЗИКА

УДК 538.951:620.3 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_36
EDN: RGZSTD

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА a-C ПОКРЫТИЙ, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ ИМПУЛЬСНОЙ УГЛЕРОДНОЙ ПЛАЗМЫ НА НАГРЕТЫЙ ПОДСЛОЙ Ni

Д.Г. Пилипцов[1], А.С. Руденков[1], А.В. Рогачёв[1], Джоу Бин[2], Е.А. Кулеш[1], Н.Н. Федосенко[1]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*Тайюанский технический университет*

STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF a-C COATINGS DEPOSITED FROM PULSE CARBON PLASMA ON A Ni HEATED SUBLAYER

D.G. Piliptsou[1], A.S. Rudenkov[1], A.V. Rogachev[1], Zhou Bin[2], E.A. Kulesh[1], N.N. Fedosenko[1]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*Taiyuan University of Technology*

Аннотация. Определены особенности морфологии, фазового состава и механических свойств углеродных покрытий, осаждённых из импульсных потоков углеродной плазмы на подложки, содержащие подслои никеля, при изменении ее температуры до 350° С. Установлено, что термообработка Ni подслоев незначительно влияет на их твердость и модуль упругости, приводит к повышению в 1,75 раза шероховатости RMS и более чем в 4 раза размера зерна. Фазовый состав Ni / a-C покрытий, осажденных на нагретые подслои никеля, характеризуется более высокой плотностью Csp^2 кластеров, при этом с ростом температуры нагрева подложка происходит значительное снижение шероховатости. Методом инструментального наноиндентирования установлена структурная и фазовая неоднородность покрытий, проявляющаяся в немонотонном изменении модуля упругости и твердости при увеличении глубины индентирования.

Ключевые слова: *углеродные покрытия*, *нагрев подложки*, *никель*, *структура*, *механические свойства.*

Для цитирования: *Структура и механические свойства* a-C *покрытий, осажденных из импульсной углеродной плазмы на нагретый подслой* Ni / Д.Г. Пилипцов, А.С. Руденков, А.В. Рогачёв, Джоу Бин, Е.А. Кулеш, Н.Н. Федосенко // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 36–43. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_36. – EDN: RGZSTD

Abstract. The features of the morphology, phase composition and mechanical properties of the carbon coatings deposited from pulsed flows of carbon plasma onto the substrates containing nickel sublayers are determined when its temperature changes to 350 °C. It has been established that heat treatment of Ni sublayers has a slight effect on hardness and elasticity modulus, leading to an increase in roughness RMS by 1.75 times and a more than 4-fold increase in grain size. The phase composition of Ni / a-C coatings deposited on heated nickel sublayers is characterized by a higher density of Csp^2 clusters, and with increasing heating temperature of the substrate, a significant decrease in roughness occurs. Using the method of instrumental nanoindentation, the structural and phase heterogeneity of coatings was established, which manifests itself in a non-monotonic change in the elastic modulus and a significant decrease in hardness with increasing indentation depth.

Keywords: *carbon coatings*, *substrate heating*, *nickel*, *structure*, *mechanical properties.*

For citation: *Structure and mechanical properties of* a-C *coatings deposited from pulse carbon plasma on a* Ni *heated sublayer* / D.G. Piliptsou, A.S. Rudenkov, A.V. Rogachev, Zhou Bin, E.A. Kulesh, N.N. Fedosenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 36–43. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_36 (in Russian). – EDN: RGZSTD

Введение

Процессы межфазного взаимодействия в углеродсодержащих многослойных покрытиях, определяющие в значительной степени их свойства, являются зависящими от большого числа факторов, в числе которых выделяют природу, геометрические параметры отдельных слоев, условия и режимы их формирования [1]. При осаждении таких покрытий из импульсной катодной плазмы значительное влияние на их структуру и свойства оказывают также энергия ионов углерода, плотность потока, температура подложки [1], [2].

В ранее проведенных работах установлено влияние подслоев меди [1], алюминия [1], титана [2], хрома [3] и соединений на их основе [1] на структурно-фазовый состав и механические свойства углеродных (a-C) покрытий. Показано, что каталитическое или ингибирующее влияние подслоев, протекающие диффузионные процессы наиболее значимы в граничных, толщиной до 30 нм углеродных слоях. Определяющую роль в формировании фазового состава, структуры углеродных конденсатов играют температура поверхности подложки, плотность потока поступающих на поверхность ионов. При этом толщина межфазного диффузионного слоя помимо градиентов температуры и концентрации в значительной степени определяется протеканием в граничных слоях процессов химического взаимодействия [4], [5].

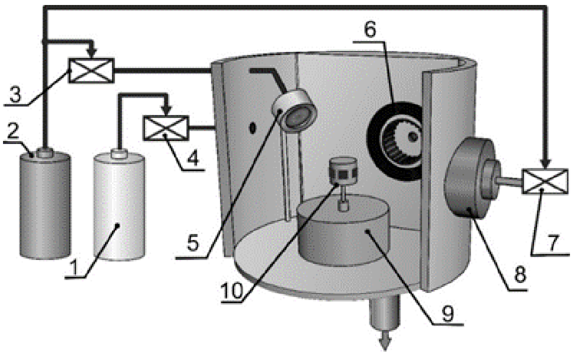
Достаточно большое количество работ посвящено изучению влияния последующей термообработки уже осаждённых покрытий на их структуру и свойства [1], [4], [5]. Установлено, что ее проведение при оптимальных режимах позволяет стабилизировать структуру и, за счет активации химического взаимодействия между элементами в объёме покрытия, повысить механические свойства, снизить уровень внутренних растягивающих напряжений, увеличить его износостойкость [6]. Определяющее влияние температуры подложки на процессы роста a-C покрытий, зарождение центров sp^3 фазы подтверждено и в рамках субимплантационной модели [7].

Наряду с температурой подложки существенное влияние на изменение структурно-фазового состава a-C покрытий оказывает также и природа подслоя металла. В отличие от карбидообразующих металлов, таких как хром, титан, цирконий, и инертных (медь, серебро), никель оказывает специфическое влияние на процессы адсорбционного взаимодействия атомов углерода, используется при синтезе высокоупорядоченных углеродных материалов (графена, алмазов) в качестве катализатора зарождения активных центров, и при этом является хорошим конструкционным материалом, на основе которого формируют износостойкие и самосмазывающиеся покрытия [8]–[10]. Также известно, что никель плохо растворяется в углероде, содержится в нем в виде самостоятельной фазы и не взаимодействует с ним при невысоких температурах [9], [10]. В связи с этим практический и научный интерес представляет установление закономерностей влияния подслоя никеля на процессы структурообразования углеродной матрицы, морфологические параметры, фазовый состав и механических свойств углеродных покрытий, осаждённых из импульсных потоков углеродной плазмы на термически активированную подложку, что и составляет цель настоящей работы.

1 Оборудование и методы исследования

Формирование двухслойных Ni / a-C покрытий проводили путем последовательного осаждения слоя никеля магнетронным испарением и слоя углерода из плазмы импульсного катодно-дугового разряда с помощью устройства, схема которого представлена на рисунке 1.1.

В качестве подложек использовали полированные пластины монокристалла кремния (100) толщиной 0,5 мм. Перед нанесением покрытий подложки промывали с использованием органических растворителей (ацетон, спирт) в ультразвуковой ванне при температуре 50° C с последующей промывкой в дистиллированной воде и сушкой на воздухе. После размещения подложек в вакуумной камере и ее откачки до остаточного давления $3\cdot10^{-3}$ Па проводили их очистку с использованием тлеющего разряда. Для формирования подслоев никеля магнетронным методом распыляли катод диаметром 80 мм и толщиной 4 мм, изготовленный из никеля (Н0). Парциальное давление Ar в рабочей камере составляло $4\cdot10^{-2}$ Па.



1 – баллон с кислородом,
2 – баллон с аргоном,
3 – регулятор расхода газа, откалиброванный по аргону,
4 – регулятор расхода газа, откалиброванный по кислороду,
5 – катодный узел магнетронной распылительной системы МАРС (БГУИР, Беларусь, ЭСТО-Эл, Томск, Россия),
6 – генератор углеродной плазмы,
7 – регулятор расхода газа, откалиброванный по аргону,
8 – ионный источник,
9 – узел вращения,
10 – оснастка с подложками

Рисунок 1.1 – Схема устройства для нанесения Ni / a-C покрытий

Толщина осаждаемых Ni подслоев в режиме стабилизации тока магнетронного разряда (500 мА, напряжение разряда 600 В, расход рабочего газа Γ_{Ar} = 65 мл / мин) регулировалась временем осаждения и контролировалась после нанесения покрытий профилометром Syrtronic 25 (Taylor Hobson, Англия) по перепаду высот на границе покрытие / подложка. Выбранные режимы осаждения позволили получить слои никеля с высокой прочностью адгезионного соединения с подложкой и толщиной 50 ± 5 нм.

Перед осаждением углеродного слоя подложку нагревали до температуры 150° C и 350° C. Температура контролировалась с помощью термопары. После нагрева подложкодержателя и стабилизации температуры подложки с предварительно осажденными Ni подслоями осаждали углеродный (a-C) слой из сепарированного потока углеродной плазмы, формируемой в результате испарения графитового катода импульсным разрядом при напряжении разряда 350 В и частоте следования импульсов 3 Гц. Количество импульсов разряда 3000.

В качестве сепаратора плазменного потока, разделяющего ионную и нейтральную, микро-, нанодисперсную компоненту (макрочастицы, капли, осколки графитового катода), использовали электромагнитный фильтр, выполненный в виде криволинейного соленоида с углом поворота плазменного потока на 90 градусов. Отличительной особенностью данного соленоида является его включение в электрическую схему блока питания импульсного генератора углеродной плазмы, что обеспечивало синхронизацию переменного транспортирующего поля сепаратора с частотой разряда углеродного испарителя.

После осаждения подложки с нанесённым покрытием охлаждали в вакуумной камере при давлении $2 \cdot 10^{-3}$ Па до комнатной температуры 23° С.

Фазовый состав покрытий определяли методом спектроскопии комбинационного рассеивания с помощью КР микроскопа Senterra (Bruker), возбуждение спектров осуществлялось излучением с длиной волны 532 нм и мощностью 20 мВт. Разложение регистрируемых спектров на *D* (центр вблизи 1380 см$^{-1}$) и *G* пики (с центром около 1520…1580 см$^{-1}$) осуществляли по методу Гаусса. Параметры структуры углеродных покрытий оценивали по изменению положения *G* пика, его полной ширины на полувысоте (FWHM) и отношению интенсивностей I_D / I_G [11], [12]. Математическую обработку спектров проводили с использованием лицензионной программы Opus (Bruker Optik GmbH).

Морфологию покрытий изучали методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) в режимах измерения топографии и фазового контраста с применением прибора Solver-PRO P47 (NT-MDT, РФ). В результате последующей математической обработки трехмерного изображения рельефа определяли шероховатость RMS и размер зерна.

Исследование механических свойств покрытий проводили методом индентирования в режиме динамического механического анализа («НаноСкан 4D», ФГБНУ «ТИСНУМ», г. Троицк, РФ). В качестве индентора использовали алмазную трехгранную пирамидку Берковича. Перед началом измерений проводилась калибровка податливости системы и формы индентора на эталонном образце с известным модулем упругости и твердостью (плавленый кварц). При этом типичная амплитуда колебаний составила порядка нескольких нанометров при максимальной нагрузке 40мН. Измерение проводили при глубине индентирования 60 ± 3 нм. Полученные кривые анализировали в рамках модели Оливер-Фара [13], что позволяет получить всю необходимою информацию о твердости и упругости исследуемых покрытий [14], [15]. С целью обеспечения метрологически достоверных значений измеренных параметров на каждом образце покрытий проводилось по 15 измерений при идентичных условиях нагружения, затем результаты усредняли.

Известно [16], [17], что высокая твердость покрытий как правило определяет высокую износостойкость, особенно в условиях абразивного трения, а значения модуля упругости Юнга характеризуют усталостную прочность. Для определения перспективы применения разрабатываемых слоев в качестве покрытий триботехнического назначения наряду с параметрами, характерными для кинетики трения, такими как коэффициент трения, износостойкость, термостойкость, важными являются значения стойкости к упругой деформации, так называемый индекс пластичности, определяемый как H / E, и стойкость к пластической деформации H^3 / E^2 [15], [16].

2 Полученные результаты и их анализ

На начальном этапе исследования определялись закономерности влияния температуры термообработки на изменение поверхностной морфологии и механических свойств подслоя никеля.

Из приведенных на рисунке 2.1 АСМ изображений поверхности осажденных Ni подслоев до и после термообработки при различной температуре следует, что слои Ni являются сплошными, характеризуются отсутствием дефектов и капельной фазы. При этом с ростом температуры отжига наблюдается увеличение перепада высот, шероховатости RMS, размера зерна (таблица 2.1), что указывает на протекание активной термической активации диффузионных процессов [18].

При этом твердость покрытия незначительно увеличивается после термообработки. Стоит отметить, что модуль упругости нагретых до 350° С покрытий несколько возрастает, что является следствием формирования более плотной структуры.

Определены фазовый состав и морфология алмазоподобных покрытий, осажденных на подслои никеля. При этом осаждение a-C слоя проводилось при режиме генерации импульсных потоков углеродной плазмы, обеспечивающем высокое содержание sp^3 гибридизированных атомов углерода и минимальное радиационное воздействие на подложку (нагрев не более 10° С).

Приведенные на рисунке 2.2 спектры КР осажденных слоистых покрытий характерны для аморфных углеродных покрытий и представляют собой ассиметричный пик, расположенный в области от 1000 до 2000 см$^{-1}$ с центром, локализованным в области 1600 см$^{-1}$. В спектрах КР установлено наличие *D*- и *G*-пиков различной интенсивности, что характерно для разупорядоченных углеродных материалов.

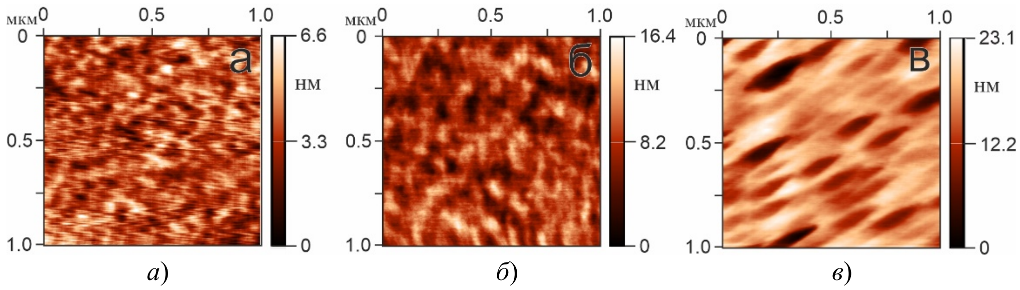


Рисунок 2.1 – АСМ изображения поверхности покрытий Ni толщиной 50 нм, осажденных на кремниевую подложку: *а*) без отжига, б) после отжига при 150° С, в) после отжига при 350° С

Таблица 2.1 – Параметры морфологии и механические свойства Ni подслоев

Шероховатость RMS, нм	Размер зерна *D*, нм	H ± 10 %, ГПа	E ± 10 %, ГПа
без термообработки			
1,6	11,7	6,4	193
термообработка при 150° С			
2,1	16,9	7,8	192
термообработка при 350° С			
2,8	48,9	7,7	215

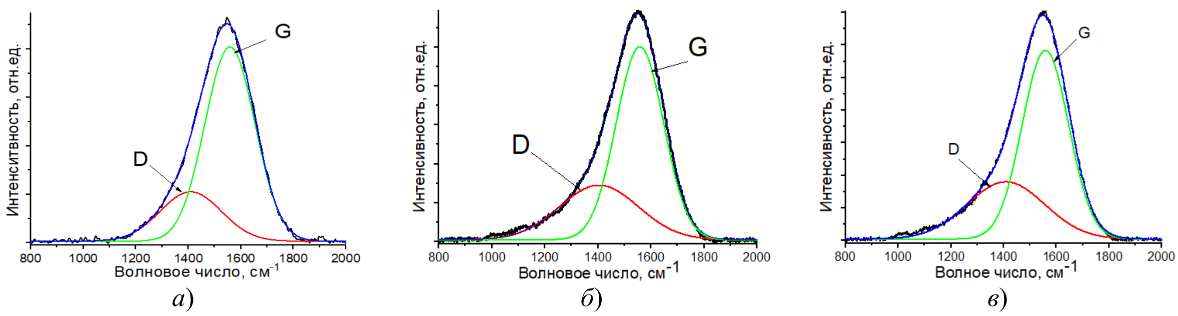


Рисунок 2.2 – Спектры КР Ni/a-C покрытий (толщина a-C слоя 110±5 нм):
а) без нагрева подложки, *б*) температура нагрева подложки 150 ± 20° С,
в) температура нагрева подложки 350 ± 20° С

При интерпретации данных КР спектроскопии следует учитывать, что проявление D-пика связано с дыхательной модой sp^2-гибридизованных кластеров, проявляющейся в КР-спектрах разупорядоченных структур, при этом смещение *D* пика возможно вследствие формирования твердых растворов за счет протекания процессов диффузии [19]. В то же время наличие *G*-пика обусловлено возбуждением валентных колебаний sp^2-гибридизованного углерода [11], [12].

Анализ представленных спектров КР согласуется с результатами работ [20], [21] и показывает, что форма спектров КР осажденных покрытий, зависящая от отношения концентраций атомов углерода с sp^2- и sp^3 типом гибридизации связей [9], [11], [12], [20], изменяется с увеличением температуры нагрева подложки, что является признаком сложного характера распределения углеродных фаз как в граничном диффузионном слое, так и в объёме углеродного слоя под действием температуры. Как показано в работах [1], [4], такое поведение спектральных кривых наиболее выражено при малых толщинах углеродного слоя, осажденного на подслоях металла или нитрида, и определяется особенностями структурообразования покрытий на начальных стадиях осаждения, характеризующихся высоким структурным беспорядком и несовершенством структуры растущего a-C покрытия при конденсации атомов / ионов углерода на поверхности подложки, изменением количества центров зарождения sp^3 фазы, а также зависит от интенсивности диффузии кислорода в объём покрытия, происходящего после разгерметизации вакуумной камеры, что приводит к изменению sp^2 / sp^3 отношения атомов углерода.

При толщине более 80 нм структура a-C покрытий становиться завершенной, снижается количество дефектов, что приводит к формированию более равновесной структуры и снижению влияния Ni подслоя на процессы структурообразования, при этом протекание дальнейших процессов структурообразования определяется температурой подложки, которая оказывает влияние на подвижность адсорбированных атомов углерода, размер графитовых кластеров.

Стоит отметить, что положения центров *D*- и *G*-пиков в спектрах КР полученных покрытий отличаются незначительно (таблица 2.2). При этом наблюдается увеличение I_D / I_G отношения с ростом температуры нагрева подложек, однако точная оценка данного отношения не позволяет количественно установить изменение фазового состава атомов углерода в покрытиях, так как значения I_D / I_G отношения определяются не только отношением sp^2/sp^3 атомов углерода с различной гибридизацией связей [12], но и степенью упорядоченности графитовой компоненты покрытия [12], [20], [21].

Основываясь на полученных результатах (таблица 2.2), а также с учетом работ [4], [5] с повышением температуры нагрева подложки должно происходит снижение содержания Csp^3 фазы, однако в полученных слоистых Ni / a-C покрытиях на структуру аморфной углеродной матрицы оказывает влияние как рост толщины диффузионного слоя, вызванный температурой нагрева подложки, так и увеличение размера зерна Ni подслоя, определяющее увеличение площади границ раздела между аморфной углеродной матрицей и металлическим подслоем, что является причиной увеличения степени структурного беспорядка углеродной матрицы. Результаты, приведенные в таблице 2.2, находятся в соответствии с ТК отношением [21], определяющим увеличение I_D / I_G отношения с ростом степени разупорядоченности или уменьшении размера Csp^2-кластеров.

При температуре нагрева подложки 350° С ширина *G* пика уменьшается, что указывает на количественные превращения в микроструктуре углеродной матрицы, вызванные увеличением доли атомов углерода с sp^2-типом гибридизации связей. Также известно, что ширина пика КР определяется дисперсией по размерам Csp^2 кластеров и, чем больше его ширина, тем больше различия между размерами Csp^2 кластеров.

Соответственно процессы структурообразования в Ni / a-C покрытиях определяются протеканием конкурирующих процессов, на которые оказывает влияние как наличие Ni подслоя, так и температура нагрева подложки:

1) в Ni / a-C покрытий, осажденных на холодную подложку, формируются Csp^2 кластеры, характеризующиеся широким распределением по размеру;

2) с ростом температуры нагрева в углеродной матрице не происходит формирование крупных Csp^2 кластеров, а только увеличение их количества за счет слияния мелких (до 2 нм) Csp^2 кластеров. С увеличением температуры нагрева подложки в покрытиях образуется больше незначительно отличающихся по размерам разупорядоченных Csp^2-кластеров, что подтверждается как уменьшением ширины G-пика и увеличением его интенсивности, характеризующей степень деформации углов между связями атомам углерода при формировании Csp^2 кластера, так и увеличением I_D / I_G отношения. При этом отметим, что одним из ключевых факторов, оказывающих дополнительное влияние на ширину *G*-пика, являются внутренние напряжения сжатия [16], величина которых снижается за счет наличия подслоя металла.

Результаты определения поверхностной морфологии, выполненные методом АСМ для Ni / a-C покрытий, осажденных при различной температуре подложки, приведены на рисунке 2.3.

С применением динамического полуконтактного метода удалось определить с достаточной точностью морфологические (шероховатость RMS и размер зерна Dср) и относительные механические характеристики поверхности (изображения фазового контраста). Основываясь на физических принципах построения изображений фазового контраста, можно утверждать, что более темные участки поверхности характеризуются более низкой твердостью в сравнении с более светлыми. Следовательно, можно изучить распределение фазового состава по поверхности покрытий [1].

Установлено, что покрытия характеризуются гладкой, аморфной поверхностной структурой с невыраженными границами зерен, образующих основную матрицу. На поверхности наблюдаются макрочастицы размером до 250 нм, которые, как правило, являются осколками графитового катода и достигают подложки за счет многократного отражения от арматуры вакуумной камеры или элементов конструкции внутрикамерного

Таблица 2.2 – Параметры спектров КР Ni/a-C покрытий

Толщина a-C слоя, нм	D пик положение, см $^{-1}$	D пик ширина, см $^{-1}$	G пик положение, см $^{-1}$	G пик ширина, см $^{-1}$	I_D / I_G
Без нагрева подложки					
113,0	1409,2	232,9	1558,4	187,2	0,31
Температура нагрева подложек 150 ± 20° С					
84,9	1403,8	297,08	1558,1	178,5	0,47
Температура нагрева подложек 350 ± 30° С					
82,4	1408,0	294,9	1558,0	176,5	0,50

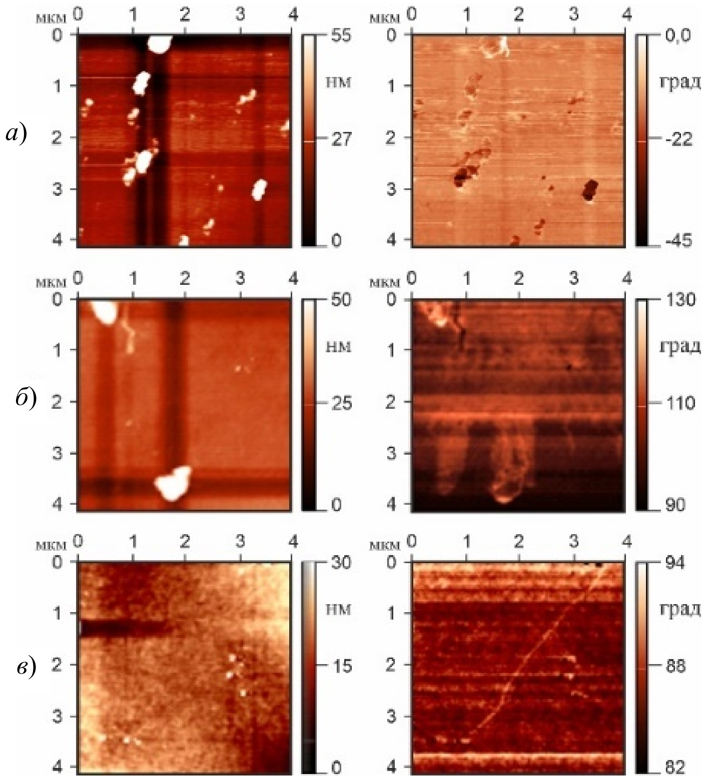


Рисунок 2.3 – АСМ изображения поверхности Ni / a-C, осажденных при температуре подложки: *а*) без нагрева подложки, *б*) 150 ± 20° C, *в*) 350 ± 20° C

сепаратора. Стоит отметить, что при толщине углеродного слоя более 80 нм, независимо от температуры нагрева подложки, влияние структурных параметров Ni подслоя на морфологию a-C покрытия отсутствует, что указывает на способность углеродного покрытия с ростом его толщины нивелировать влияние морфологических параметров подслоя.

Результаты математической обработки данных АСМ приведены в таблице 2.3, из которой следует, что с ростом температуры нагрева подложка происходит значительное снижение шероховатости Ni / a-C покрытий, сопровождающееся незначительным увеличением размера зерна на поверхности.

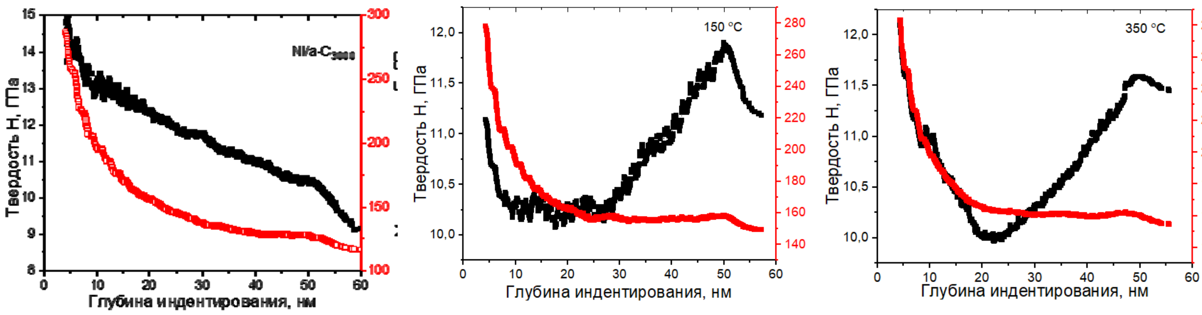
Таблица 2.3 – Параметры поверхностной морфологии a-C покрытий

Толщина a-C слоя, нм	Шероховатость RMS, нм	Размер зерна D, нм
Без нагрева подложки		
113,0	3,8	8,3
Температура нагрева подложки 150 ± 20° C		
84,9	2,7	8,8
Температура нагрева подложки 350 ± 30° C		
82,4	0,9	9,3

Полученные результаты не в полной мере согласуются с известными представлениями о процессах структурообразования при нагреве [18], [19], [22]. Снижение шероховатости при осаждении на более нагретый подслой никеля свидетельствует о доминировании латерального механизма роста углеродных частиц, что возможно при повышении взаимодействия адатомов углерода с подложкой и снижении поэтому их вклада в формирование купола частиц.

Механические свойства слоистых покрытий определяли путем измерения трех основных характеристик: твердости H (ГПа), модуля упругости E (ГПа) и коэффициента упругого восстановления η (%). Также рассчитывались параметры H / E и H^3 / E^2, позволяющие прогнозировать износостойкость покрытий, их способность сопротивляться нагрузкам в зоне контакта [13], [15]. Приведенные на рисунке 2.4 кривые индентирования покрытий характеризуют изменение механических свойств в зависимости от глубины внедрения индентора. Полученные значения твердости и их изменения при увеличении глубины индентирования, нагреве подложки на стадии нанесения покрытия являются следствием проявления структурной и фазовой неоднородности покрытий, протекания процессов дефектообразования, деформационного упрочнения под индентором, межслойной деформации при нагружении.

Установлено, что при малой глубине индентирования (до 10 нм) твёрдость и модуль упругости соответствуют значениям, характерным для



а) *б*) *в*)

Рисунок 2.4 – Изменение твердости и модуля упругости Ni / a-C, осажденных при температуре подложки: *а*) без нагрева подложки, *б*) 150 ± 20° C, *в*) 350 ± 20° C

a-C слоя, незначительно снижаясь с ростом температуры нагрева подложек. Также можно отметить, что для покрытий, осажденных при более высоких температурах нагрева подложки, с ростом глубины индентирования наблюдается увеличение влияния Ni подслоя на величину твердости, что связано как с изменением структурно-фазового состава углеродной матрицы, а также, согласно данным таблицы 2.1, с увеличением твердости подслоя Ni за счет перестройки его структуры под действием температуры (рисунок 2.1 *б*, *в*).

Приведенные в таблице 2.4 значения отношений H / E и H^3 / E^2 изменяются в достаточно широких пределах, что позволяет прогнозировать различия в механизмах изнашивания и трения данных покрытий.

Таблица 2.4 – Механические свойства Ni / a-C покрытий, осажденных при различной температуре подложки

Твердость H_B, ГПа	Модуль упругости E, ГПа	H / E	H^3 / E^2	η (%)
Без нагрева				
14,7	179,1	0,062	0,113	76,5
Температура нагрева подложек 150 ± 20° C				
10,5	211,7	0,049	0,025	61, 4
Температура нагрева подложек 350 ± 30° C				
11,2	230,2	0,048	0,026	58,3

Высокие значения H^3 / E^2 отношения для Ni / a-C покрытий, осажденных на холодную подложку, указывают на их более высокую износостойкость, а значения H / E отношения – на высокую хрупкость, что не всегда позволяет обеспечить высокую стабильности пары трения. Низкие значения этих параметров, полученные для покрытий, осажденных на нагретую подложку, свидетельствуют о повышении пластической деформации покрытий в области контактного нагружения. Установленное при этом снижение поверхностной шероховатости RMS покрытий с ростом температуры нагрева определяет повышение площади фактического контакта, что снижает среднею температуру в зоне трения за счет более интенсивного отвода генерируемого тепла и, соответственно, термоокислительную деструкцию углеродного слоя, и увеличивает, таким образом, ресурс работы пары трения.

Заключение

Установлены особенности влияния подслоя никеля, температуры подложки на морфологические параметры, фазовый состав и механические свойства углеродных покрытий, осаждённых из импульсных потоков углеродной плазмы. Установлено, что термообработка Ni подслоев до температуры 350° C в течение 60 минут приводит к повышению в 1,75 раза шероховатости RMS и более чем в 4 раза размера зерна. При этом твердость и модуль упругости покрытия незначительно увеличивается после термообработки.

Показано, что при толщине углеродного слоя более 80 нм, независимо от температуры нагрева подложки, влияние структурных параметров Ni подслоя на морфологию a-C покрытия отсутствует. При этом фазовый состав Ni / a-C покрытий, осажденных на нагретые подслои никеля, характеризуется более высокой плотностью Csp^2 кластеров. С ростом температуры нагрева подложка происходит значительное снижение шероховатости Ni / a-C покрытий, сопровождающееся незначительным увеличением размера зерна на поверхности, что свидетельствует о доминировании латерального механизма роста углеродных частиц, повышении взаимодействия адатомов углерода с подложкой.

Методом инструментального наноиндентирования установлена структурная и фазовая неоднородность покрытий, проявляющаяся в немонотонном изменении модуля упругости и существенном снижении твердости при увеличении глубины индентирования. При осаждении на нагретые подложки Ni / a-C покрытия проявляют более высокую пластичность, что, с учетом формирования менее шероховатых слоев, позволяет прогнозировать их более высокие триботехнические свойства.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Композиционные углеродные покрытия, осажденные из импульсной катодной плазмы* / Д.Г. Пилипцов [и др.]; под ред. А.В. Рогачева. – Москва: Радиотехника, 2020. – 283 с.

2. *Размерные эффекты в бислойных покрытиях титан углерод.* 1. *Влияние толщины подслоя титана на структуру и свойства углеродного слоя* / Чжоу Бин [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2013. – № 4 (17). – С. 38–43.

3. *Jiang*, *X.* Effect of Cr layer on the structure and properties of Cr/DLC films / X. Jiang, A.V. Rogachev, D.G. Piliptsov // Eurasian Chem.-Technol. J. – 2016. – Vol. 18. – P. 275–281.

4. *Influence of annealing on the structure and properties of carbon coatings containing* Ti *and* TiN *layers* / D.G. Piliptsou [et al.] // Diam. Relat. Mater. – 2023. – Vol. 135. – P. 109890.

5. *Influence of ion energy and substrate temperature on the optical and electronic properties of tetrahedral amorphous carbon* (ta-C) *films* / M. Chhowalla [et al.] // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 81. – P. 139–145.

6. *Inkin*, *V.N.* Internal stresses in ta-C films deposited by pulse arc discharge method / V.N. Inkin, G.G. Kirpilenko, A.J. Kolpakov // Diam. Relat. Mat. – 2001. – Vol. 10. – P. 1103–1108.

7. *Lifshitz*, *Y.* Substantiation of subplantation model for diamondlike film growth by atomic force microscopy / Y. Lifshitz, G.D. Lempert, E. Grossman // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 72. – P. 2753–2756.

8. *Получение и свойства композиционного покрытия на основе никеля* / В.В. Иванов [и др.] // Успехи современного естествознания. – 2015. – № 1–8. – С. 1335–1338.

9. *Influence of chemical bond of carbon on* Ni *catalyzed graphitization* / M. Yudasaka [et al.] // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 81 (11). – P. 7623–7629.

10. *On the mechanisms of precipitation of graphene on nickel thin films* / L. Baraton [et al.] // Europhysics Letters. – 2011. – Vol. 96 (4). – P. 46003.

11. *Diamond-like carbon films: electron spin resonance* (*ESR*) *and Raman spectroscopy* / B. Druz [et al.] // Diam. Relat. Mater. – 2004. – Vol. 13. – P. 1592–1602.

12. *Systematic variation of the Raman spectra of DLC films as a function of* sp^2:sp^3 *composition* / S. Prawer [et al.] // Diam. Relat. Mater. – 1996. – Vol. 5. – P. 433–438.

13. *Oliver*, *W.C.* An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments / W.C. Oliver, G.M. Pharr // Journal of Materials Research. – 1992. – Vol. 7 (6). – P. 1564–1583.

14. ISO 14577-2:2015. – *Part* 2: *Metallic materials. Instrumented indentation test for hardness and materials parameters. Verification and calibration of testing machines*.

15. *Leyland*, *A.* On the significance of the *H* / *E* ratio in wear control: a nanocomposite coating approach to optimised tribological behavior / A. Leyland, A. Matthews // Wear. – 2000. – Vol. 246 (1–2). – P. 1–11.

16. *Cheng*, *Y.T.* Relationships between hardness, elastic modulus and the work of indentation / Y.T. Cheng, C.M. Cheng // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 73 (5). – P. 614–618.

17. *Luo*, *J.* Young's modulus of electroplated Ni thin film for MEMS applications / J. Luo // Materials Letters. – 2004. – Vol. 58. – P. 2306–2309.

18. *Self-assembled Ni nanoclusters in a diamond-like carbon matrix* / E.H.T. Teo [et al.] // International Journal of Nanotechnology. – 2007. – Vol. 4 (4). – P. 424–430.

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

20. *Ferrari*, *A.C.* Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon / A.C. Ferrari [et al.] // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 61. – P. 14095–14107.

21. *Tuinstra*, *F.* Raman spectrum of graphite / F. Tuinstra [et al.] // J. Phys. Chem. – 1970. – Vol. 53. – P. 1126–1130.

22. *Banerji*, *A.* High temperature tribological behavior of Wcontaining diamond-like carbon (DLC) coating against titanium alloys / A. Banerji, S. Bhowmick, A.T. Alpas // Surf. Coat. Technol. – 2014. – Vol. 241. – P. 93–104.

23. *Goldschmidt*, *H.* The structure of carbides in alloy steels / H. Goldschmidt // J. Iron Steel Inst. – 1948. – Vol. 160. – P. 345.

24. *On the growth of polycrystalline diamond on transition metals by microwave-plasma-assisted chemical vapour deposition* / K. Mallika [et al.] // Philos. Mag. B. – 1999. – Vol. 79 (4). – P. 593–624.

25. *Chen*, *X.* Effect of the chemical nature of transition-metal substrates on chemical-vapor deposition of diamond / X. Chen, J. Narayan // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 4168.

26. *Spectroscopic studies on DLC* / *TM* (Cr, Ag, Ti, Ni) *multilayers* / S. Gyathri [et al.] // Mater. Res. Bull. – 2012. – Vol. 47. – P. 843–849.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (*проект* № Т22КИТГ-014 *на* 2022–2024 *г.*), *а также National Key R&D Program of China* (№ 2022YFE0123000).

Поступила в редакцию 05.01.2024.

Информация об авторах

Пилипцов Дмитрий Геннадьевич – к.т.н., доцент
Руденков Александр Сергеевич – к.ф.-м.н., доцент
Рогачёв Александр Владимирович – чл.-корр. НАН Беларуси, д.х.м., профессор
Джоу Бин – к.т.н., профессор
Кулеш Екатерина Александровна – мл.н.с.
Федосенко Николай Николаевич – к.т.н., доцент

УДК 535.36 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_44
EDN: SBVDBQ

ПЕРЕМЕЩЕНИЕ И ЛОКАЛИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ В ИДЕАЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ГРАДИЕНТНОЙ СИЛЫ СВЕТОВОГО ДАВЛЕНИЯ

А.Ч. Свистун, Э.В. Мусафиров, Л.С. Гайда, Е.В. Матук

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы

MOVEMENT AND LOCALIZATION OF NANOPARTICLES IN AN IDEAL LIQUID UNDER THE INFLUENCE OF THE GRADIENT FORCE OF LIGHT PRESSURE

A.Ch. Svistun, E.V. Musafirov, L.S. Gaida, E.V. Matuk

Yanka Kupala State University of Grodno

Аннотация. Проведен теоретический анализ качественного поведения решений уравнения Ланжевена для движения сферической диэлектрической наночастицы, находящейся в интерференционном поле, формируемом при наложении встречных пучков лазерного излучения под действием градиентной силы без учета силы сопротивления среды. Показано, что в зависимости от начальных условий возможны два различных режима движения наночастиц – локализация наночастиц в одном из максимумов интерференционной картины излучения или неограниченное удаление от начального положения в пределах интерференционного поля.

Ключевые слова: *диэлектрические наночастицы*, *радиационные силы*, *рассеяние света*, *интерференция электромагнитных волн.*

Для цитирования: *Свистун*, *А.Ч.* Перемещение и локализация наночастиц в идеальной жидкости под действием градиентной силы светового давления / А.Ч. Свистун, Э.В. Мусафиров, Л.С. Гайда, Е.В. Матук // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 44–49. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_44. – EDN: SBVDBQ

Abstract. A theoretical analysis of the qualitative behavior of solutions to the Langevin equation for the motion of a spherical dielectric nanoparticle located in an interference field formed by the superposition of oncoming laser beams under the action of a gradient force without taking into account the resistance force of the medium is carried out. It is shown that, depending on the initial conditions, two different modes of movement of nanoparticles are possible – localization of nanoparticles in one of the maxima of the interference pattern of radiation or unlimited distance from the initial position within the interference field.

Keywords: *dielectric nanoparticles*, *radiation forces*, *light scattering*, *interference of electromagnetic waves.*

For citation: *Svistun*, *A.Ch.* Movement and localization of nanoparticles in an ideal liquid under the influence of the gradient force of light pressure / A.Ch. Svistun, E.V. Musafirov, L.S. Gaida, E.V. Matuk // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 44–49. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_44 (in Russian). – EDN: SBVDBQ

Введение

Проблема воздействия оптического излучения на частицы вещества актуализировалась после создания мощных лазерных источников светового излучения. В настоящее время существует множество работ, в которых сообщается об исследовании действия силы светового давления на наночастицы с учётом физических свойств не только наночастиц [1]–[6], но и среды, в которой они расположены [7]–[9]. Не менее важными факторами, влияющими на эффективность взаимодействия оптического излучения с частицами вещества, являются параметры (степень когерентности, объемная плотность энергии, мощность и т. д.) лазерного излучения [10]. В экспериментах по манипулированию малыми частицами с использованием силы светового давления обычно используются сфокусированные пучки излучения лазеров непрерывного действия [11]–[13]. Посредством формирующих оптических систем удаётся сконцентрировать энергию лазерного излучения в узком пучке, чем обеспечивается возможность более эффективного управления локализацией микро- и наночастиц [14]–[16], особенно интересного в медицинских приложениях. С использованием силы светового давления можно управлять не только потоком клеток, но и отдельно взятой биологической клеткой [17], [18].

Большое внимание уделяется изучению действия силы светового давления на металлические сферические наночастицы, расположенные вблизи диэлектрической подложки [19], [20], на диэлектрические сферические частицы вблизи металлических структур [21], [22], а также на системы нескольких металлических наноразмерных объектов [23], [24]. При этом в зависимости от типа возбуждаемой плазмонной моды (смена типа моды может достигаться в результате как управляемого изменения расстояния между металлическими объектами [24], так и варьирования длины волны падающего излучения) направление силы светового давления может изменяться. Это означает, что между облучаемыми лазером металлическими наночастицами возможно и притяжение и отталкивание, что представляется весьма интересным в наноплазмонике.

В работах [25], [26] сообщалось о результатах теоретического исследования транспортировки металлических наночастиц в поле сфокусированного лазерного излучения под действием силы светового давления. Особое внимание в них уделено изменению силы светового давления в условиях, соответствующих проявлению плазмонного резонанса в сфероидальной металлической наночастице [27]. Показано, что величина силы светового давления существенно зависит от ориентации наночастиц относительно направления падающего лазерного пучка.

В работе профессора Н.Г. Хлебцова [28] содержится краткий обзор известных к началу XXI века теоретических и экспериментальных работ об изучении оптических свойств металлических частиц и их применении для направленной доставки медицинский препаратов к биологическим мишеням посредством силы светового давления. Профессором В.В. Бучановым с соавторами в [29] продемонстрирована возможность перемещения микрочастиц (клеток) в поле излучения фемтосекундного лазера и манипулирования их положением при варьировании силы светового давления. Перспективной для медицинских приложений оказалась и показанная в [30] возможность деструкции патологических клеток и резекции фрагмента от скопления раковых клеток вследствие разрыва связей между ними при многофотонном поглощении излучения биологическими объектами в поле фемтосекундных световых импульсов.

Исследование зависимости распределения наночастиц, помещенных в прозрачную жидкость, по размерам на характеристики четырехволнового преобразователя излучения сделано в работе [31]. Показано, что в зависимостях амплитудного коэффициента отражения и времени выхода на стационарное значение полуширины полосы пространственных частот от дисперсии наблюдаются экстремумы, при которых коэффициент отражения принимает наибольшее, а время выхода наименьшее значения.

В работе [32] проведен анализ вида пространственного спектра объектной волны, образующейся в процессе четырехволнового взаимодействия в схеме с горизонтально распространяющимися волнами накачки в зависимости от массы наночастиц в прозрачной суспензии. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании систем нелинейной адаптивной оптики на основе прозрачных суспензий наночастиц для задач коррекции мелкомасштабных фазовых искажений сигнальной волны.

Изучение сепарации наночастиц в прозрачной полидисперсной водной суспензии с различными типами распределений по размерам под действием силы светового давления (на основе стационарного решения уравнения диффузии), возникающей в поле лазерного излучения интенсивностью 0,5–500 кВт/см^2, рассмотрено в работе [33]. Установлено, что на дно кюветы преимущественно будут осаждаться частицы радиусом более 100 нм, а концентрация более мелких наночастиц во всем объеме суспензии останется без изменений. В случае симметричного начального распределения наночастиц по размерам воздействие интенсивного светового пучка на суспензию приводит к нарушению симметрии кривой функции распределения, а также смещению максимума в область меньших размеров частиц на облучаемой поверхности.

Теоретическое исследование диэлектрической проницаемости, соответствующей плазмонным осцилляциям в эллипсоидальной наночастице с учетом вкладов по малому отношению размера наночастицы к длине волны приведено в работе [34]. Основное внимание в данной работе было уделено так называемым дипольным плазмонным осцилляциям, эффективно возбуждаемым почти однородным электрическим полем, возникающим вблизи наночастицы при действии на нее плоской монохроматической электромагнитной волной излучения лазера. На основе интегральных уравнений по объему наночастицы предложена общая схема нахождения поправок по волновому числу к электростатическому выражению для диэлектрической проницаемости плазмонных осцилляций произвольной мультипольности.

В настоящее время, несмотря на большое количество работ по данной тематике, остается нераскрыт вопрос качественного анализа уравнения движения частицы, а также получение новых теоретических данных по управляемой транспортировке и локализации наноразмерных частиц, находящихся в жидкой среде, силами светового давления лазерного излучения.

1 Основные соотношения

Сила светового давления, действующая на частицу в пространственно модулированном лазерном луче, может быть условно разделена на две составляющие: составляющую, направленную вдоль градиента интенсивности света, т. е. градиентную силу $\vec{F}_{\text{grad}}$, и составляющую, действующую вдоль направления распространения луча, и состоит из силы поглощения $\vec{F}_{\text{abs}}$ и рассеивающей силы $\vec{F}_{\text{scat}}$.

Для рассматриваемой нами прозрачной наночастицы $\vec{F}_{\text{abs}} = 0$ и, следовательно,

$$\vec{F} = \vec{F}_{\text{grad}} + \vec{F}_{\text{scat}}.$$

Поскольку интенсивности встречно распространяющихся лазерных лучей, образующих стоячую волну, равны, то $\vec{F}_{\text{scat}} = 0$ и влияние излучения на наночастицу полностью обусловлено только градиентной составляющей силы.

Интенсивность излучения будет определяться следующим уравнением:

$$I(z) = I_0(1 + \cos(2kz)),$$

где $k = (\omega/c)n$ – волновое число, ω – частота излучения, n – показатель преломления жидкости.

В приближении Рэлея, когда размеры частицы малы по сравнению с длиной волны излучения, выражение для градиентной силы $\vec{F}_{\text{grad}}$ можно записать в виде:

$$\vec{F}_{\text{grad}} = \vec{z} \cdot 2\pi \frac{n}{c} \alpha \frac{dI(z)}{dz} = -\vec{z} \cdot 4\pi \frac{n}{c} \alpha I_0 k \sin(2kz),$$

где $\alpha = R^3 \dfrac{\overline{m}^2 - 1}{\overline{m}^2 + 2}$ – поляризуемость сферической наночастицы радиуса R $(kR << 1)$, $\overline{m} = n_0/n$, n_0 – показатель преломления частицы.

Уравнение движения наночастицы, размещённой в идеальной жидкости под действием силы $\vec{F}_{\text{grad}}$ аналогично математическому уравнению маятника и имеет вид:

$$m\frac{d^2z}{dt^2} = -4\pi \frac{n}{c} \alpha I_0 k \sin(2kz), \qquad (1.1)$$

или

$$\frac{d^2z}{dt^2} + 4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 k \sin(2kz) = 0.$$

Заменяя ускорение наночастицы $a = \dfrac{dv}{dt} = \dfrac{dv}{dt}\dfrac{dz}{dz} = \dfrac{vdv}{dz}$, получим

$$\frac{vdv}{dz} = -4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 k \sin(2kz).$$

Разделяя переменные и интегрируя обе части, получим

$$\int vdv = \int -4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 k \sin(2kz) dz.$$

Решение данного уравнения имеет вид

$$\frac{v^2}{2} = 2\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 \cos(2kz) + C$$

или

$$v = \pm\sqrt{4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 \cos(2kz) + 2C},$$

где C – постоянная интегрирования, которую найдем из начальных условий $(t_0 = 0$, $z_0 = \pi/2k$, $v_0 \neq 0)$.

Подставим начальные условия в последнее уравнение:

$$v_0 = \pm\sqrt{4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 \cos\left(2k \frac{\pi}{2k}\right) + 2C},$$

или

$$v_0^2 = 4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 \cos(\pi) + 2C.$$

Откуда, $C = \dfrac{v_0^2}{2} + 2\pi \dfrac{n}{mc} \alpha I_0$.

Возвращая постоянную интегрирования в уравнение, получим

$$v = \pm\sqrt{4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0 \cos(2kz) + v_0^2 + 4\pi \frac{n}{mc} \alpha I_0}, \qquad (1.2)$$

т. е. зависимость скорости от координаты периодическая с периодом π / k.

На рисунке 1.1 представлена теоретическая зависимость скорости сферической диэлектрической наночастицы, находящейся в интерференционном поле, формируемом при наложении встречных пучков лазерного излучения под действием градиентной силы без учета силы сопротивления среды от времени, построенная на основании уравнения (1.2).

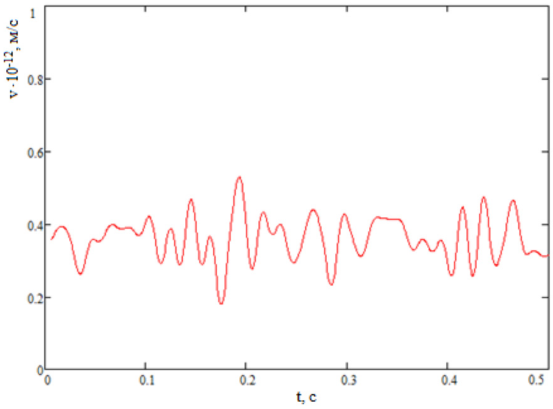


Рисунок 1.1 – Зависимость скорости движения наночастицы в поле лазерного излучения от времени $(n = 1{,}33$, $\alpha = 0{,}53$, $m = 5{,}5 \cdot 10^{-18}$ кг $I_0 = 5{,}093 \cdot 10^6$ Вт/м^2, $\lambda = 532$ нм, $v_0 = 10^{-3}$ м/с)

Представляя $v = \dfrac{dz}{dt}$ и разделяя переменные, можно получить закон движения наночастицы, имеющий достаточно громоздкий вид, который сложен для анализа качественного поведения решений.

2 Исследование качественного поведения решений

В уравнении (1.1) выполним подстановку $z(t) = \dfrac{x(t)}{2k}$, получим уравнение

$$m\ddot{x} = -\frac{8\alpha I_0 k^2 n\pi}{c}\sin x,$$

где $\ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2}$. Введем замену параметров $s = \frac{8\alpha I_0 k^2 n\pi}{c}$, тогда уравнение (1.1) примет вид

$$m\ddot{x} + s\sin x = 0. \quad (2.1)$$

Заметим, что уравнение (2.1) эквивалентно системе уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = -\frac{s}{m}\sin x. \end{cases} \quad (2.2)$$

Фазовой поверхностью системы (2.2) является цилиндр. Особыми точками (точками равновесия) этой системы на развертке фазового цилиндра являются точки $(x, y) = (0,0)$ и $(x, y) = (\pm\pi, 0)$. Заметим, что замена переменных $(x, y) \to (-x, -y)$ не изменяет систему (2.2), т. е. фазовый портрет системы (2.2) симметричен относительно начала координат.

Матрица Якоби системы (2.2) имеет вид

$$J(x, y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{s\cos x}{m} & 0 \end{pmatrix}.$$

Для особой точки $(\pm\pi, 0)$ собственные числа матрицы Якоби $J(\pm\pi, 0)$ есть $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{s/m}$. Учитывая, что $m, s > 0$, получим два действительных числа разных знаков. Тогда точка $(\pm\pi, 0)$ является седлом – неустойчивым состоянием равновесия (рисунок 2.1).

Для особой точки $(0,0)$ собственные числа матрицы Якоби $J(0,0)$ есть $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{-s/m}$. Учитывая, что $m, s > 0$, получим пару чисто мнимых чисел. Тогда точка $(0,0)$ – либо центр (окружена замкнутыми траекториями), либо фокус (окружена спиралями). Перемножая уравнения системы (2.2), получим уравнение $my\,dy = -s\sin x\,dx$, общий интеграл которого $my^2 = 2s\cos x + C$, т. е. функция

$$V(x, y) = my^2 - 2s\cos x$$

является первым интегралом системы (2.2), производная функции $V(x, y)$ в силу системы (2.2) есть

$$\dot{V}(x, y) = \frac{\partial V}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial V}{\partial y}\dot{y} =$$

$$= (2s\sin x)y - 2my\frac{s\sin x}{m} \equiv 0.$$

Тогда траектории системы (2.2) находятся на линиях уровня функции V. Для достаточно малых $\varepsilon > 0$ (при $0 < \varepsilon < 2s$) линии уровня $V^{-1}(\varepsilon)$ представляют собой замкнутые кривые, окружающие точку $(0,0)$. Эти кривые не содержат точек равновесия и, следовательно, точка $(0,0)$ является центром (рисунок 2.1).

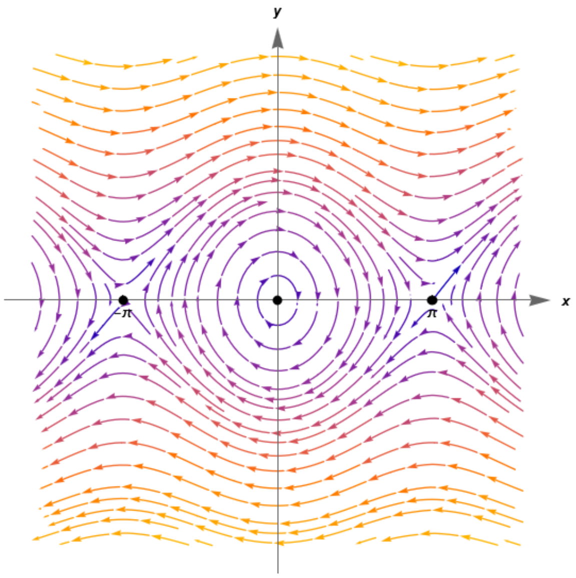


Рисунок 2.1 – Фазовый портрет системы (2.2)

Заметим, что в [35] изучается движение прозрачной наночастицы сферической формы в пространственно модулированном лазерном луче под действием градиентной силы с учетом силы сопротивления среды, которое описывается системой уравнений

$$\begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = -\frac{b}{m}y - \frac{s}{m}\sin x, \end{cases} \quad (2.3)$$

где $b = 6\pi\eta R$, η – динамический коэффициент вязкости жидкости, R – радиус сферической наночастицы.

Эта система отличается от системы (2.2) наличием слагаемого $-\frac{b}{m}y$ в правой части второго уравнения. Система (2.3) имеет те же особые точки, но характер точки $(0,0)$ с ростом параметра $b > 0$ сначала меняется на устойчивый фокус (при $b < 2\sqrt{ms}$), а затем на устойчивый узел (при $b \ge 2\sqrt{ms}$).

Заметим, что системы (2.2) и (2.3) являются автономными, и, следовательно, с помощью подходов, изложенных в [36]–[40], результаты анализа качественного поведения решений системы (2.3) (или при $b = 0$ системы (2.2), а значит и уравнения (1.1)) можно распространить на решения специальным образом возмущенных (с сохранением отражающей функции Мироненко) систем и, в частности, системы

$$\begin{cases} \dot{x} = y(1+\beta(t)), \\ \dot{y} = -\frac{by + s\sin x}{m}(1+\beta(t)), \end{cases} \quad (2.4)$$

которая эквивалентна уравнению

$$\ddot{x}+\frac{b\left(1+\beta(t)\right)^2-m\dot{\beta}(t)}{m\left(1+\beta(t)\right)}\dot{x}+\frac{s\left(1+\beta(t)\right)^2\sin x}{m}=0,$$

где $\beta(t)$ – непрерывная скалярная функция. При этом возмущенная система (2.4) сохраняет (при дополнительных условиях на функцию $\beta(t)$) многие качественные свойства решений исходной системы (2.3), такие как наличие периодических решений и устойчивость решений по Ляпунову [36].

Заключение

В работе проведен теоретический анализ качественного поведения решений уравнения Ланжевена для движения прозрачной наночастицы сферической формы в пространственно модулированном лазерном луче под действием градиентной силы без учета силы сопротивления среды (в идеальной жидкости). Построен фазовый портрет этого уравнения. Показано, что в зависимости от начальных условий возможны два различных режима движения наночастиц – локализация наночастиц в одном из максимумов интерференционной картины излучения или неограниченное удаление от начального положения в пределах интерференционного поля.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Granqvist*, *C.G.* Optical properties of ultrafine gold particles / C.G. Granqvist, O. Hunderi // Phys. Rev. B. – 1977. – Vol. 16, № 8. – P. 3513–3534.

2. *Doyle*, *W.T.* Optical properties of a suspension of metal spheres / W.T. Doyle // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39, № 14. – P. 9852–9858.

3. *О радиационных силах, действующих на прозрачную наночастицу в поле сфокусированного лазерного пучка* / А.А. Афанасьев [и др.] // Квантовая электроника. – 2015. – Т. 45, № 10. – С. 904–907.

4. *Свистун*, *А.Ч.* Локализация диэлектрической сферической наночастицы под действием двух радиационных сил в поле сфокусированного лазерного пучка гауссовой формы / А.Ч. Свистун, Л.С. Гайда, Е.В. Матук // Журнал прикладной спектроскопии. – 2019. – Т. 86, № 2. – С. 298–303.

5. *Савельев*, *М.В.* Пространственно-временные характеристики четырёхволнового преобразователя излучения с учётом поля тяжести Земли, действующего на растворённые в прозрачной жидкости наночастицы / М.В. Савельев, А.Д. Ремзов // Компьютерная оптика. – 2022. – Т. 46, № 4. – С. 547–554.

6. *Движение серебряных наночастиц в жидкости с различной вязкостью под действием сил светового давления* / А.А. Афанасьев [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2016. – № 4 (29). – С. 7–12.

7. *Rogovin*, *D.* Phase conjugation in liquid suspensions of microspheres in the diffusive limit / D. Rogovin, S.O. Sari // Phys. Rev. A. – 1985. – Vol. 31, № 4. – P. 2375–2389.

8. *Концентрационная нелинейность суспензии прозрачных микросфер под действием градиентной силы в поле периодически модулированного лазерного излучения* / А.А. Афанасьев [и др.] // Квантовая электроника. – 2016. – Т. 46, № 10. – С. 891–894.

9. *Afanas'ev*, *A.A.* Effect of focusing the laser beam on the radiation Gaussian forces acting on the transparent nanoparticle / A.A. Afanas'ev, L.S. Gaida, A.Ch. Svistun // Zurnal Prikladnoj Spektroskopii. – 2016. – Vol. 83, № 6–16. – P. 77–78.

10. *Влияние оптических параметров лазерного излучения и металлической наночастицы на ее транспортировку силами светового давления* / Л.С. Гайда [и др.] // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2018. – Т. 8, № 3. – С. 93–101.

11. *Aberration correction in holographic optical tweezers* / K.D. Wulff [et al.] // Opt. Express. – 2006. – Vol. 14. – P. 4169–4174.

12. *Исследование локализации углеродных нанотрубок, взвешенных в жидкости, под действием градиентной силы в интерференционном поле лазерного излучения* / Л.С. Гайда [и др.] // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2009. – № 1 (77). – С. 121–127.

13. *Wang*, *L.G.* Dynamic radiation force of a pulsed Gaussian beam acting on Rayleigh dielectric sphere / L.G. Wang, C.L. Zhao // Opt. Express. – 2007. – Vol. 15, № 17. – P. 10615–10621.

14. *Гайда*, *Л.С.* Движение металлической наночастицы в кровезамещающей жидкости под действием лазерного излучения / Л.С. Гайда, Е.В. Матук, А.Ч. Свистун // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2022. – Т. 12, № 2. – С. 104–112.

15. *Гайда*, *Л.С.* Взаимодействие электромагнитного излучения с сфероидальными металлическими наночастицами в жидкости / Л.С. Гайда, Е.В. Матук, А.Ч. Свистун // Проблемы физики, математики и техники. – 2018. – № 1 (34). – С. 24–28.

16. *Матук*, *Е.В.* Вращение наночастиц в эллиптически поляризованном электромагнитном поле / Е.В. Матук, Л.С. Гайда, А.Ч. Свистун // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2023. – Т. 13, № 3. – С. 109–117.

17. *Single-molecule biomechanics with optical methods* / A.D. Mehta [et al.] // Science. – 1999. – Vol. 283, № 5408. – P. 1689–1695.

18. *Afzal*, *R.S.* Optical tweezers using a diode laser / R.S. Afzal, E.B. Treacy // Rev. Sci. Instrum. – 1992. – Vol. 63. – P. 2157–2163.

19. *Chaumet*, *P.C.* Electromagnetic force on a metallic particle in the presence of a dielectric surface / P.C. Chaumet, M. Nieto-Vesperinas // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 62, № 16. – P. 11185–11191.

20. *Chaumet*, *P.C.* Optical trapping and manipulation of nano-objects with an apertureless probe / P.C. Chaumet, A. Rahmani, M. Nieto-Vesperinas // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 88, № 12. – P. 123601 (1–4).

21. *Quidant*, *R.* Radiation forces on a Rayleigh dielectric sphere in a patterned optical near field / R. Quidant, D. Petrov, G. Badenes // Opt. Lett. – 2005. – Vol. 30. – P. 1009–1011.

22. *Surface plasmon radiation forces* / G. Volpe [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 96, № 23. – P. 238101.

23. *Halterman*, *K.* Plasmonic resonances and electromagnetic forces between coupled silver nanowires / K. Halterman, J.M. Elson, S. Singh // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72, № 7 – P. 075429.

24. *Lamothe*, *E.* Optical forces in coupled plasmonic nanosystems: Near field and far field interaction regimes / E. Lamothe, G. Leveque, Olivier J.F. Martin // Opt. Express. – 2007. – Vol. 15, № 15. – P. 9631–9644.

25. *Barton*, *J.P.* Theoretical determination of net radiation force and torque for a spherical particle illuminated by a focused laser beam / J.P. Barton, D.R. Alexander, S.A. Schaub // J. Appl. Phys. – 1989. – Vol. 66. – P. 4594–4602.

26. *Gouesbet*, *G.* Generalized Lorenz-Mie theories / G. Gouesbet, G. Grehan. – Berlin: Springer-Verlag, 2011. – P. 190–212.

27. *Григорчук*, *Н.И.* Сила давления оптического изучения на сфероидальную металлическую наночастицу вблизи плазмонного резонанса / Н.И. Григорчук, Н.И. Томчук // Физика низких температур. – 2007. – Т. 33, № 10. – С. 1119–1127.

28. *Хлебцов*, *Н.Г.* Оптика и биофотоника наночастиц с плазмонным резонансом / Н.Г. Хлебцов // Квантовая электроника. – 2008. – Т. 38, № 6. – С. 504–529.

29. *Оптические манипуляторы микрочастицами, использующие излучение фемтосекундных лазеров* / В.В. Бучанов [и др.] // Квантовая электроника. – 2010. – Т. 40, № 5. – С. 446–450.

30. *Залесский*, *А.Д.* Оптический лазерный манипулятор фемтосекундными импульсами / А.Д. Залесский // Труды МФТИ. – 2009. – Т. 1, № 1. – С.53–58.

31. *Альдебенева*, *К.Н.* Влияние распределения частиц по размерам на характеристики четырехволнового преобразователя излучения в прозрачной двухкомпонентной среде / К.Н. Альдебенева, В.В. Ивахник, М.В. Савельев // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2019. – Т. 22, № 1. – С. 4–9.

32. *Ремзов*, *А.Д.* Встречное четырехволновое взаимодействие в прозрачной суспензии наночастиц в поле тяжести Земли / А.Д. Ремзов, М.В. Савельев // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2021. – Т. 85, № 12. – С. 1770–1775.

33. *Иванов*, *В.И.* Сепарация частиц в полидисперсной наносуспензии в поле лазерного излучения / В.И. Иванов, С.А. Пячин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – № 13. – С. 146–155.

34. *Гузатов*, *Д.В.* Плазмонные осцилляции дипольной мультипольности в трехосном наноэллипсоиде / Д.В. Гузатов, А.Ч. Свистун // Вестник Гродненского государственного университета имени Я. Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. Биология. – 2009. – № 3 (87). – С. 104–109.

35. *Локализация диэлектрической сферической наночастицы под действием градиентной силы в интерференционном поле*, *формируемом при наложении встречных пучков лазерного излучения* / А.Ч. Свистун [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2023. – Т. 90, № 4. – С. 599–605.

36. *Musafirov*, *E.* Non-Autonomously Perturbed Autonomous Systems of Ordinary Differential Equations / E. Musafirov // Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems. Series B: Applications and Algorithms. – 2022. – Vol. 29, № 6. – P. 447–454.

37. *Мусафиров*, *Э.В.* Допустимые возмущения модели Костицына «хищник-жертва» / Э.В. Мусафиров // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. – 2015. – № 7–2 (18–2). – С. 248–252.

38. *Мусафиров*, *Э.В.* Допустимые возмущения обобщенной системы Носе – Гувера в одном случае / Э.В. Мусафиров // Ползуновский альманах. – 2020. – № 1. – С. 221–222.

39. *Мусафиров*, *Э.В.* Допустимые возмущения системы Лэнгфорда / Э.В. Мусафиров // Проблемы физики, математики и техники. – 2016. – № 3 (28). – С. 47–51.

40. *Мусафиров*, *Э.В.* Нестационарные дифференциальные системы, эквивалентные системе Лотки – Вольтерра с логистической поправкой / Э.В. Мусафиров // Наука Красноярья. – 2012. – № 1 (01). – С. 97–104.

Поступила в редакцию 18.10.2023.

Информация об авторах

Свистун Андрей Чеславович – к.ф.-м.н., доцент
Мусафиров Эдуард Владимирович – к.ф.-м.н., доцент
Гайда Леонид Станиславович – д.ф.-м.н., профессор
Матук Евгениюш Веславович – к.ф.-м.н., доцент

УДК 537.533.7:621.793.18:678 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_50
EDN: SILLPY

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И АНТИФУНГИЦИДНЫЕ СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ КЛОТРИМАЗОЛА И ПОЛИМЕРОВ, СФОРМИРОВАННЫХ ИЗ АКТИВНОЙ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

М.А. Ярмоленко[1], Цзян Сяо Хун[2], А.А. Рогачёв[3], А.В. Рогачёв[1], А.С. Руденков[1], О.А. Ярмоленко[4], С.А. Фролов[1]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*Нанкинский университет науки и технологии*
[3]*Институт химии новых материалов Национальной Академии Наук Беларуси, Минск*
[4]*Гомельский государственный медицинский университет*

MOLECULAR STRUCTURE AND ANTI-FUNGICIDAL PROPERTIES OF COATINGS BASED ON CLOTRIMAZOLE AND POLYMERS FORMED FROM THE ACTIVE GAS PHASE

M.A. Yarmolenko[1], Jiang Xiao Homg[2], A.A. Rogachev[3], A.V. Rogachev[1], A.S. Rudenkov[1], V.A. Yarmolenko[4], S.A. Frolov[1]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*Nanjing University of Science and Technology*
[3]*Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus*, *Minsk*
[4]*Gomel State Medical University*

Аннотация. Определены особенности молекулярной структуры, химического состава и антифунгицидные свойства покрытий на основе клотримазола, полиуретана (ПУ), поливинилхлорида (ПВХ), сформированных из активной газовой фазы, образованной электронно-лучевым диспергированием соединений в вакууме. Установлено, что химический состав покрытия на основе клотримазола практически полностью соответствует химическому составу исходного лекарственного соединения. Некоторое снижение хлора в покрытии в сравнении с исходным лекарственным соединением объясняется частичной деструкцией C – Cl связей под действием потока электронов. Установлена высокая эффективность регулирования пролонгированного высвобождения лекарственного соединения путем формирования композиционных покрытий. Показано, что фунгицидная активность композиционных покрытий в значительной степени определяется свойствами полимерной матрицы. Более высокую фунгицидную активность проявляют покрытия на основе клотримазола и продуктов электронно-лучевого диспергирования ПВХ.

Ключевые слова: *электронно-лучевое диспергирование*, *покрытие*, *клотримазол*, *полиуретан*, *поливинилхлорид*, *молекулярная структура*, *свойства.*

Для цитирования: *Молекулярная структура и антифунгицидные свойства покрытий на основе клотримазола и полимеров*, *сформированных из активной газовой фазы* / М.А. Ярмоленко, Цзян Сяо Хун, А.А. Рогачёв, А.В. Рогачёв, А.С. Руденков, О.А. Ярмоленко, С.А. Фролов // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 50–56. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_50. – EDN: SILLPY

Abstract. The features of the molecular structure, chemical composition and antifungicidal properties of the coatings based on clotrimazole, polyurethane (PU), polyvinyl chloride (PVC), formed from the active gas phase formed by electron beam dispersion of compounds in a vacuum, were determined. It was found that the chemical composition of the clotrimazole-based coating almost completely corresponds to the chemical composition of the original drug compound. A slight decrease in chlorine in the coating compared to the original drug compound is explained by the partial destruction of C – Cl bonds under the influence of an electron flow. The high efficiency of regulating the prolonged release of a drug compound by forming composite coatings has been established. It has been shown that the fungicidal activity of composite coatings is largely determined by the properties of the polymer matrix. The coatings based on clotrimazole and graphitized PVC exhibit higher activity.

Keywords: *electron beam dispersion*, *coating*, *clotrimazole*, *polyurethane*, *polyvinyl chloride*, *molecular structure*, *properties.*

For citation: *Molecular structure and anti-fungicidal properties of coatings based on clotrimazole and polymers formed from the active gas phase* / M.A. Yarmolenko, Jiang Xiao Homg, A.A. Rogachev, A.V. Rogachev, A.S. Rudenkov, V.A. Yarmolenko, S.A. Frolov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 50–56. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_50 (in Russian). – EDN: SILLPY

Введение

Наиболее актуальной проблемой современной медицины является возникновение биопленок на поверхности имплантатов. При этом, несмотря на наличие современных противомикробных препаратов, смертность от инфекций, вызванных образованием биопленок, остаётся высокой с прогнозируемым ее дальнейшим ростом в будущем [1], [2]. Особое место занимают смешанные биопленки, представляющие собой сообщества бактерий и грибков. В полимикробных биопленках реализуются сложные физические и биологические взаимодействия между бактериями и грибками, что значительно повышает их устойчивость к противомикробным и противогрибковым лекарственным соединениям, средствам системной и местной терапии. Одним из направлений предупреждения возникновения биопленок на поверхностях имплантатов является снижение бактериальной адгезии к имплантату. Это возможно путем придания имплантату заданной топографии [3], использования функциональных слоев, содержащих в своем объеме антибактериальные и антифунгальные соединения. Высокая шероховатость поверхности имплантата способствует быстрому образованию биопленки. Нанесение тонкослойных покрытий с заданными поверхностными антибактериальными и противомикробными свойствами не влияет на физико-механические характеристики имплантатов и позволяет в полном объеме реализовать принцип самоочищения в результате их медленного растворения в организме.

Выбор лекарственного препарата, удовлетворяющего требованиям, предъявляемым для такого рода покрытий с учетом специфики имплантата, является сложной задачей. Помимо медико-биологических аспектов, важным является выбор наиболее эффективных, с технологической точки зрения, приемов нанесения покрытий, гарантирующих их функциональные свойства в течение заданного периода лечения. Снижение до минимума вероятности возникновения устойчивых патогенных микроорганизмов может быть достигнуто одновременным применением нескольких лекарственных соединений, характеризующихся различным механизмом бактерицидного действия [4], [5]. Метод электронно-лучевого диспергирования исходных соединений позволяет в стерильных условиях наносить покрытия на основе широкой номенклатуры лекарственных и полимерных материалов, характеризующихся различной кинетикой высвобождения лекарственного компонента [6]. По мнению ряда авторов, наиболее перспективными материалами матрицы, обеспечивающей контролируемое высвобождение лекарственного соединения, являются биокерамики, наночастицы металлов, широкий класс органических ненасыщенных соединений [7], [8]. При этом комбинирование неорганических и органических соединений позволяет формировать покрытия с повышенными прочностными характеристиками, являющимися также источником не только лекарственного компонента, но и минеральных элементов.

Основной целью настоящей работы является установление молекулярной структуры, химического состава и противогрибковых свойств покрытий на основе клотримазола, полиуретана (ПУ), поливинилхлорида (ПВХ), формируемых из активной газовой фазы, образованной электронно-лучевым диспергированием соединений в вакууме. Выбор клотримазола ($C_{22}H_{17}ClN_2$) в качестве лечебного препарата обусловлен его высокими антибактериальными и притивомикробными свойствами и, так как он практически не растворим, формирование покрытий на его основе из активной газовой фазы является обоснованным.

1 Методика проведения эксперимента

Покрытия осаждали из потока летучих продуктов электронно-лучевого диспергирования содинений в соответствии с методикой, приведенной в [9]. Плотность потока электронов составляла $j = (0{,}01–0{,}03)$ А/см^2, энергия E до 1600 эВ. Формирование покрытий осуществляли при достижении в вакуумной камере давления остаточных газов $\approx 4 \cdot 10^{-3}$ Па. Лекарственное вещество смешивалось с порошками ПУ, ПУ$_2$, ПВХ и ПВХ$_2$. Порошки ПУ$_2$ и ПВХ$_2$ получали путем предварительного электронно-лучевого диспергирования полимера по методике, представленной в работе [10]. Покрытие на основе ПВХ$_2$ содержит преимущественно графитоподобные структуры и полиеновые фрагменты, имеет регулярные поры размером 300–700 нм, обладает высокой стойкостью к истиранию, что определяет его эффективное применение в качестве матрицы подложки (носителя) для антибактериальных слоев [9].

Толщина покрытий контролировалась непосредственно в процессе нанесения с помощью кварцевого измерителя. Сравнительному анализу подвергаются покрытия только с одинаковой эффективной толщиной.

В качестве материала подложек при проведении ИК исследований использованы пластины NaCl, кремниевые пластины – при проведении рентгенофотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), титановые пластины – при микробиологических исследованиях.

Химический состав осажденных покрытий определяли методом РФЭС. Измерения проводили на спектрометре PHI Quantera II Scanning XPS Microbrobe, используя Al Kα в качестве источника монохроматического рентгеновского излучения ($h\nu = 1486{,}6$ эВ). Калибровку прибора осуществляли по линии C1s с энергией связи 284,6 эВ. Обработка полученных результатов осуществлялась с помощью математического приложения OriginPro.

ИК спектроскопические исследования выполнялись на ИК-Фурье спектрофотометре Vertex-70 (Bruker) с использованием стандартной ячейки на пропускание. Спектры регистрировались в диапазоне волновых чисел 4000 – 400 см$^{-1}$ с разрешением 4 см$^{-1}$.

ЯМР ^{1}Н спектры исходных лекарственных соединений и покрытий получали с использованием спектрометра Bruker Avance 400 МГц.

Оценка противогрибковой активности покрытий проводилась стандартным диск-диффузионным методом. Для этого суточную культуру гриба *Candida albicans* АТСС 10231 в концентрации 10^{4} КОЕ развели до 10^{-2}, что соответствует микробной нагрузке 100 грибных тел в мл, объем пробы 100 мкл, засевали сплошным газоном на поверхность плотной питательной среды для культивирования грибов (агар Сабуро 4%-декстрозный). Затем помещали диски с покрытиями на основе клотримазола. Контрольный образец представлял собой образец покрытия без лекарственного соединения. Чашки Петри, содержащие диски, инкубировали в термостате при (35±1)° С на протяжении 48 ч. О наличии противогрибковой активности (качественная реакция) судили по образованию вокруг дисков зон задержки роста тест-штамма. При определении степени выраженности активности принимали во внимание размер зоны отсутствия роста колоний, полное/неполное ингибирование роста колоний, прорастание колоний на поверхности диска, по периметру диска и иные обстоятельства.

2 Результаты и их обсуждение

Установлено, что в ИК-спектре покрытия на основе клотримазола присутствуют все полосы поглощения, характерные для порошка исходного лекарственного соединения (рисунок 2.1). Отличия спектров проявляются в изменении положения отдельных полос поглощения и значений их оптической плотности. Подобные изменения могут быть обусловлены различным физическим состоянием рассматриваемых соединений и, соответственно, различной степенью реализации межмолекулярного взаимодействия в тонком слое и порошке [10].

В ИК спектре покрытия полоса при 750 см$^{-1}$ характеризуется наибольшим значением оптической плотности. Отмеченную полосу связывают с внеплоскостными деформационными колебаниями СН в *орто*-дизамещенных ароматических соединениях. Полосы при 710 и 700 см$^{-1}$ характерны для внеплоскостных деформационных колебаний СН монозамещенных бензола. Интерес представляет сравнительный анализ полос поглощения, располагаемых в области высоких и низких значений волновых чисел ИК-спектра. В области 3200–3000 см$^{-1}$ ИК-спектра покрытия присутствуют слабо выраженные полосы при 3030, 3060 и 3087 см$^{-1}$. Известно, что валентные колебания = С – Н ароматических соединений дают полосы поглощения (обычно триплет) при 3030 см$^{-1}$.

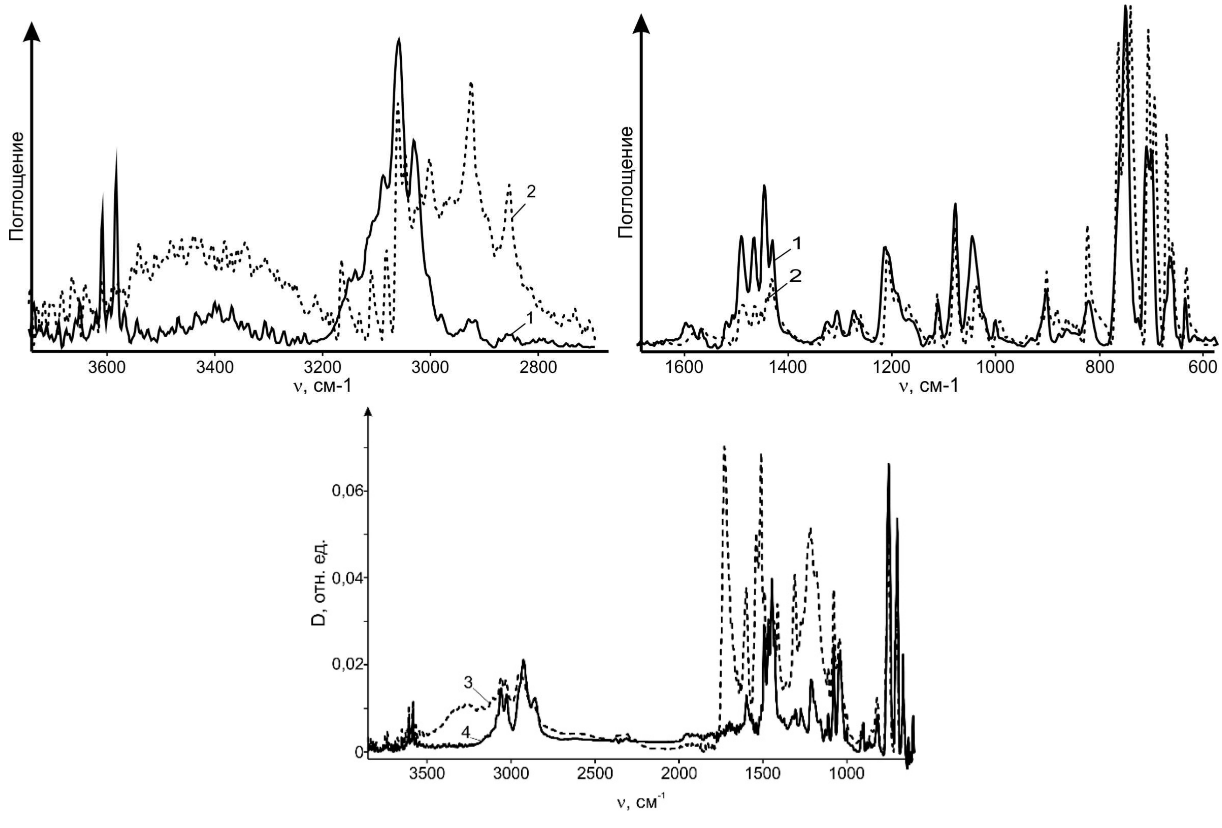


Рисунок 2.1 – ИК-спектры покрытий на основе клотримазола и порошка исходного лекарственного соединения: 1 – покрытие клотримазола; 2 – порошок клотримазола; 3 – покрытие ПУ$_2$+ клотримазол; 4 – покрытие ПВХ$_2$ + клотримазол

Изменения в агрегатном состоянии анализируемого вещества, присутствие заместителей, в частности галогенов, оказывают заметное влияние на расположение полос, вызывая ее смещение на 10–15 $см^{-1}$ в область больших значений волновых чисел [10].

Таким образом, ИК-спектроскопический анализ однозначно указывает на присутствие в структуре молекул сконденсированного соединения как моно-, так и 1,2 дизамещенных бензола. Присутствие атомов хлора в структуре осаждаемого слоя также не ставится под сомнение. При этом ИК-спектроскопия не позволяет оценить степень возможной деструкции C – Cl связей. Согласно полученным данным, в молекулярной структуре осаждаемого покрытия отсутствуют продукты разрушения имидазольного кольца. Подобное привело бы к появлению заметного поглощения в области валентных колебаний NH (3500–3300) $см^{-1}$ и CH (3000–2800) $см^{-1}$ связей. Отмеченные изменения в ИК-спектре покрытия на основе клотримазола отсутствуют.

ИК-спектр покрытия на основе клотримазола и ПВХ$_2$ представлен всеми полосами поглощения, характерными для однокомпонентных слоев. Компоненты композиционного слоя не оказывают заметного влияния на расположение полос поглощения в ИК-спектре. Подобное может быть следствием отсутствия межмолекулярного взаимодействия между компонентами различной природы в композиционном покрытии. Таким образом, композиционное покрытие представляет высокодисперсную механическую смесь исходных компонентов мишени. Анализ ИК-спектра покрытия на основе клотримазола и ПУ$_2$ затруднен наличием интенсивных полос поглощения, относящихся к фрагментам полиуретана. При этом очевидно, что в структуре сформированного композиционного слоя присутствуют оба компонента исходной мишени.

Результаты ЯМР исследований также указывают на соответствие химического состава молекул, формирующих покрытие, химическому составу исходных молекул клотримазола (рисунок 2.2).

Данный вывод в целом подтверждается также результатами исследования химического состава и структуры методом РФЭС (таблица 2.1 и рисунок 2.3). При этом следует отметить, что в осажденном слое на основе клотримазола фиксируется снижение содержания атомов азота и хлора (таблица 2.1). При этом их относительное содержание в исходном соединении и покрытии практически не изменилось.

На рисунке 2.3 представлены РФЭ спектры покрытий на основе клотримазола. Анализ спектров затруднен из-за отсутствия в литературе результатов подобных исследований. Полосу C1s раскладывали на составляющие отдельные пики. Пики при $(282{,}6 \pm 0{,}1)$ эВ, $(283{,}5 \pm 0{,}1)$ эВ и $(284{,}5 \pm 0{,}1)$ эВ характерны для бензола [11]. Полосу при $(285{,}6 \pm 0{,}2)$ эВ соотносят с колебаниями связей C – C / C – N [12], при $(289{,}5 \pm 0{,}1)$ эВ – C – Cl связей [13]. Полоса N1s также раскладывалась на составляющие пики: 395,5 – N – H [14], $(396{,}7 \pm 0{,}1)$ эВ (= N –) [15], $(398{,}5 \pm 0{,}2)$ эВ (C = N – C) [16], $(399{,}9 \pm 0{,}2)$ эВ (N – $(C)_3$) [17], 405 эВ – C – NO_2 / C – ONO / NO^- [18]. Для покрытий на основе клотримазола установлено некоторое повышение концентрации C = C связей (уменьшение отношение связей C – C / C = C), снижение числа атомов углерода с sp^2 гибридизацией.

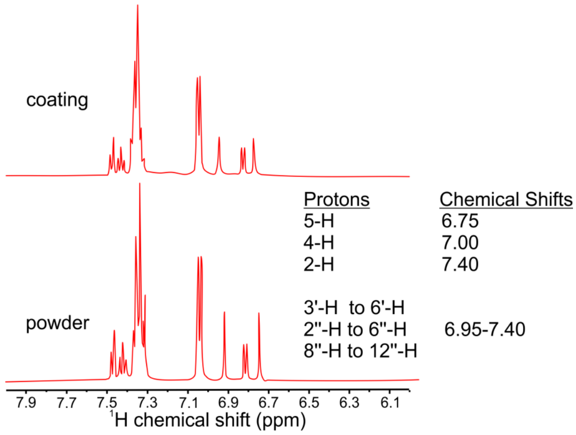


Рисунок 2.2 – ЯМР спектры исходного порошка и покрытия клотримазола

Таблица 2.1 – Элементный состав материалов

Исследуемый материал	ат. %		
	C	N	Cl
Порошок клотримазола	88	8,6	3,4
Покрытие клотримазола	90,5	6,7	2,8
Покрытие клотримазол + ПУ	93,1	6,5	0,4
Покрытие клотримазол + ПВХ	96,8	2,0	1,2

Анализ полученных спектров свидетельствует об отсутствии в покрытии на основе клотримазола продуктов деструкции бензольных колец. Воздействие потока низкоэнергетических электронов не сопровождается заметными изменениями молекулярной структуры клотримазола. В наибольшей степени деструкции подвержены C – Cl связи и имидазольные кольца. Отмечается также повышение относительного содержания ненасыщенных углеродных связей, снижение числа атомов с sp^2 гибридизацией.

Следует отметить, что анализ представленных данных для композиционных слоев не является достаточно корректным, так как данным методом анализируются поверхностные слои и поэтому необходимо учитывать нестационарность процесса диспергирования отдельных компонент композиционной мишени, более высокую скорость диспергирования клотримазола и снижение его содержания в поверхностном слое на заключительных стадиях нанесения покрытия.

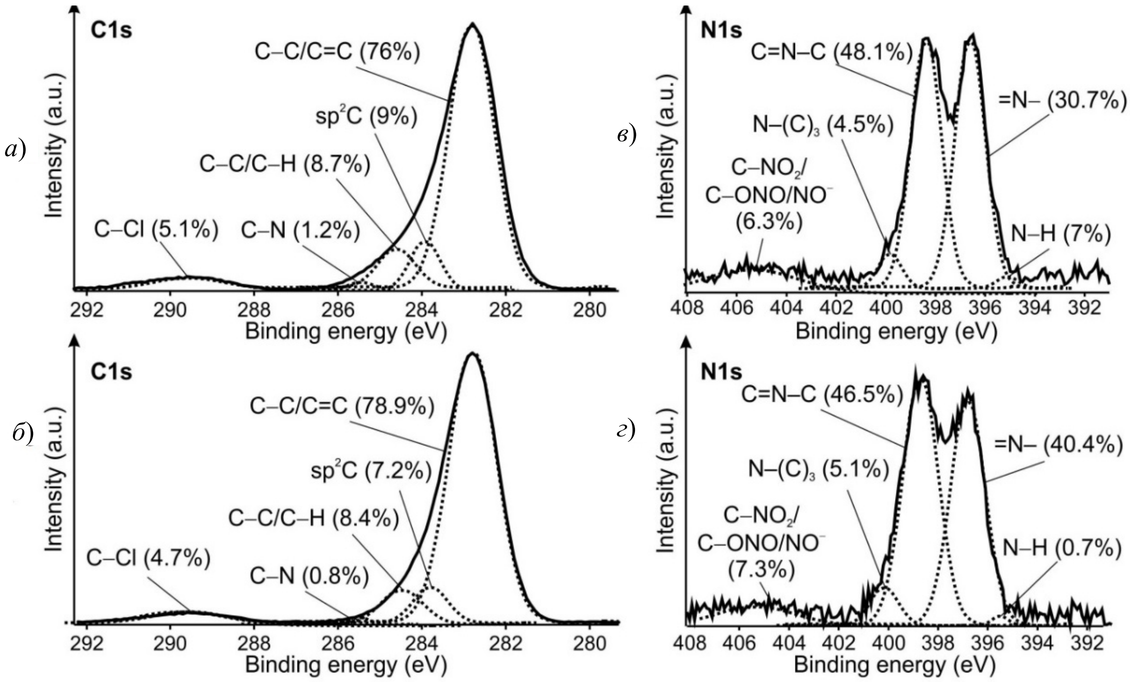


Рисунок 2.3 – РФЭ-спектры материалов на основе клотримазола:
а) порошок клотримазола; *б*) покрытие на основе клотримазола;
в) покрытие на основе ПВХ$_2$ и клотримазола; *г*) покрытие на основе ПУ$_2$ и клотримазола

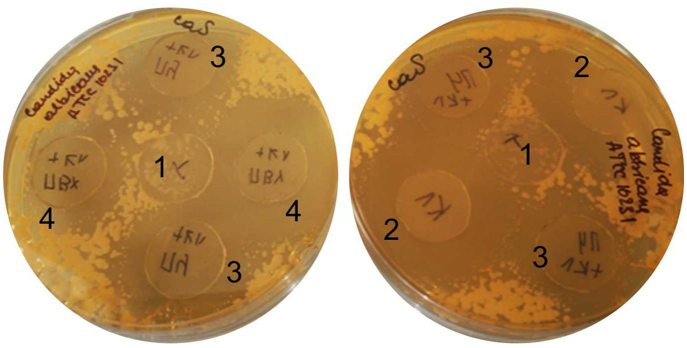


Рисунок 2.4 – Фунгицидная активность образцов в отношении *Candida albicans ATCC 10231* in vitro (качественная реакция): 1 – контрольный образец (без покрытия); 2 – покрытие на основе клотримазола; 3 – покрытие на основе ПУ$_2$ и клотримазола; 4 – покрытие на основе ПВХ$_2$ и клотримазола

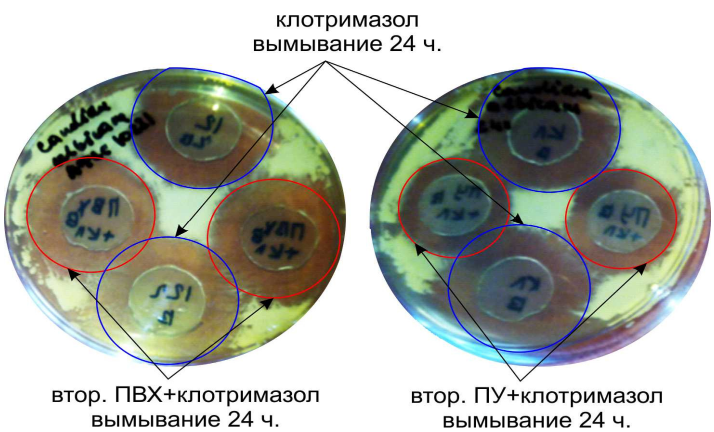


Рисунок 2.5 – Зоны подавления роста *Candida albicans ATCC 10231* после вымывания в дистиллированной воде

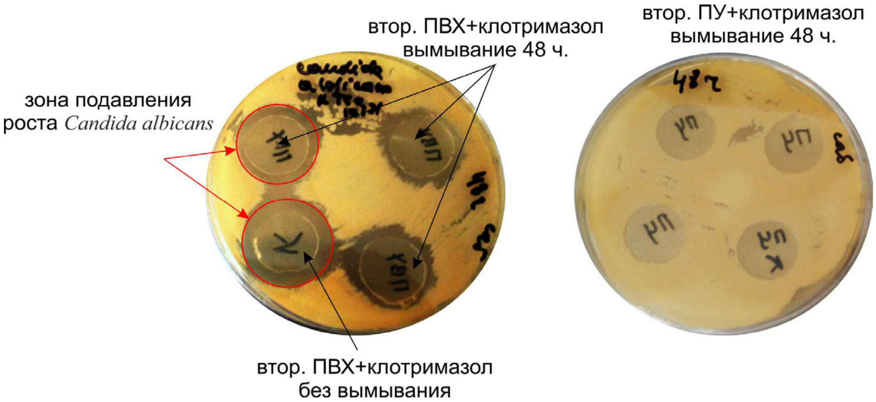


Рисунок 2.6 – Фунгицидная активность образцов в отношени *Candida albicans ATCC 10231* после 48 ч вымывания

Проведенные микробиологические исследования показали, что полученные композиционные покрытия проявляют противогрибковую активность в отношении тест-штамма (рисунок 2.4).

Вблизи образцов с композиционными покрытиями фиксировалось появление зон отсутствия роста грибка. Результаты многочисленных тест-исследований позволили установить более выраженное фунгицидное действие на Candida albicans образцов с покрытием на основе $ПВХ_2$ и клотримазола.

Выдержка образцов с нанесенными покрытиями в дистиллированной воде в течение 24 ч не сопровождается потерей антифунгальной активности. Диаметры зон подавления роста грибка составляют (30–32) мм, (35–38) мм и (35–40) мм для образцов с покрытиями $ПУ_2$ + клотримазол, $ПВХ_2$ + клотримазол и клотримазол, соответственно (рисунок 2.5).

Более длительное пребывание образцов в воде сопровождается снижением их антифунгальной активности. После нахождения в водной среде более 32 ч образцы с нанесенными слоями клотримазола и $ПУ_2$ + клотримазол полностью теряют свою активность в отношении *Candida albicans*. Фунгицидная активность сохраняется лишь для образца на основе $ПВХ_2$ + клотримазол. Для данного образца диаметр зоны подавления роста грибка после 48 ч нахождения в воде составлял (24–26) мм (рисунок 2.6).

Образцы с покрытием $ПУ_2$ + клотримазол после 48 ч нахождения в воде не подвергаются разрушению. Но при этом полностью теряется его антифунгальная активность в отличие от покрытия на основе $ПВХ_2$ + клотримазол. Причиной потери антифунгальной активности слоя на основе ПВХ + клотримазол может являться быстрое растворение лекарственного соединения. При использовании в качестве матрицы слоя на основе $ПВХ_2$ за счет его более высокой сорбционной активности реализуется высокое взаимодействие молекулами клотримазола и, как следствие этого, сохранение высокой антифунгальной активности покрытия при вымывании.

Заключение

Установлено, что химический состав покрытия, сформированного в результате воздействия потока низкоэнергетических электронов на порошок клотримазола, практически полностью соответствует химическому составу исходного лекарственного соединения. Для покрытия характерно меньшее содержание хлора в сравнении с исходным лекарственным соединением, что объясняется частичной деструкцией C – Cl связей под действием потока электронов. Установлено также повышение в покрытии относительного содержания ненасыщенных углеродных связей, снижения числа атомов с sp^2 гибридизацией.

Установлена высокая эффективность регулирования пролонгированного высвобождения лекарственного соединения путем формирования композиционных покрытий. Показано, что фунгицидная активность композиционных покрытий в значительной степени определяется свойствами полимерной матрицы. Более высокую активность проявляют покрытия на основе клотримазола и повергнутого графитизации ПВХ.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Current and novel diagnostics for orthopedic implant biofilm infections*: *a review* / D. Ronin [et al.] // APMIS. – 2022. – Vol. 130 (2). – P. 59–81.

2. *Serbanescu*, *M.A.* Role of Resident Microbial Communities in Biofilm-Related Implant Infections: Recent Insights and Implications / M.A. Serbanescu, C.G. Apple, J.S. Fernandez-Moure // Surg Infect (Larchmt). – 2023. – Vol. 24 (3). – P. 258–264.

3. *Meier*, *E.L.* Surface design strategies of polymeric biomedical implants for antibacterial properties / E.L. Meier, Y. Jang // Current Opinion in Biomedical Engineering. – 2023. – Vol. 26. – 100448.

4. *Phage and Antibiotic Combinations Reduce Staphylococcus aureus in Static and Dynamic Biofilms Grown on an Implant Material* / H. Joo [et al.] // Viruses. – 2023. – Vol. 15 (2). – P. 460.

5. *Antimicrobial peptides, conventional antibiotics, and their synergistic utility for the treatment of drug-resistant infections* / Y. Zhu [et al.] // Med. Res. Rev. – 2022. – Vol. 42 (4). – P. 1377 – 1422.

6. *Перспективы синтеза функциональных биоматериалов из активной газовой фазы* / А.В. Рогачев [и др.] // Полимерные материалы и технологии. – 2023. – Т. 9 (4). – С. 97–104.

7. *Nanocomposite multifunctional polyelectrolyte thin films with copper nanoparticles as the antimicrobial coatings* / T. Kruk [et al.] // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. – 2019. – Vol. 181. – P. 112–118.

8. *Biomimetic multilayer coatings deliver gentamicin and reduce implant-related osteomyelitis in rats* / S. Grohmann [et al.] // Biomedical Engineering / Biomedizinische Technik. – 2018. – Vol. 15. – P. 1–13.

9. *Микро- и нанокомпозиционные полимерные покрытия, осаждаемые из активной газовой фазы* / М.А. Ярмоленко, А.А. Рогачев, П.А. Лучников, А.В. Рогачев, Джанг Сянь Хун. – Москва: Радиотехника, 2016. – 424 с.

10. *Synthesis and structure of antibacterial coatings formed by electron-beam dispersion of polyvinyl chloride in vacuum* / Chun He [et al.] // Surface and Coatings Technology. – 2018. – Vol. 354. – P. 38–45.

11. *Liu, A.C.* The structure and reactivity of chemisorbed aromatics: Spectroscopic studies of benzene on Mo (110) / A.C. Liu, C.M. Friend // The Journal of Chemical Physics. – 1988. – Vol. 89. – P. 4398 – 4405.

12. *Photocatalytic removal using* g-C_3N_4 *quantum dots* / $Bi_2Ti_2O_7$ composites / T. Wang [et al.] // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2019. – Vol. 213. – P. 19–27.

13. *Foelske-Schmitz, A.* Quasi in situ XPS study of electrochemical oxidation and reduction of highly oriented pyrolytic graphite in [1-ethyl-3-methylimidazolium] [BF4] electrolytes / A. Foelske-Schmitz, D. Weingarth, R. Kotz // Electrochimica Acta. – 2011. – Vol. 56. – P. 10321 – 10331.

14. *Structure and antibacterial activity of PLA-based biodegradable nanocomposite coatings by electron beam deposition from active gas phase* / Chun He [et al.] // Progress in Organic Coating. – 2018. – Vol. 123. – P. 282–291.

15. *Synthesis and structure of antibacterial coatings formed by electron-beam dispersion of polyvinyl chloride in vacuum* / Chun He [et al.] // Surface and Coatings Technology. – 2018. – Vol. 354. – P. 38–45.

16. *Biological oxidative mechanisms for degradation of poly (lactic acid) blended with thermoplastic starch* / C.A. Rodrigues [et al.] // ACS Sustainable Chemistry & Engineering. – 2015. – Vol. 3. – P. 2756–2766.

17. *Electrical, mechanical and thermal properties of aligned silver nanowire / polylactide nanocomposite films* / D. Doganay [et al.] // Composites Part B: Engineering. – 2016. – Vol. 99. – P. 288–296.

18. *Facile synthesis of polysilsesquioxane toward durable superhydrophilic / superhydrophobic coatings for medical devices* / S. Park [et al.] // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. – 2019. – Vol. 25. – P. 97–104.

Работа выполнена в рамках выполнения НИР 21-23 *«Плазмохимический синтез, изучение структуры и свойств магнийсодержащих антибактериальных, обладающих высокой остеокондуктивностью покрытий на основе полимеров», задания «Плазмохимическое осаждение и конструкция покрытий с пролонгированным освобождением лекарственных препаратов и их применение для лечения костных повреждений» по договору с БРФФИ* №Х22КИТГ-024 *и проекта* № 2022YFE0196800 *Национального фонда естественных наук Китая Министерства науки и технологий КНР.*

Поступила в редакцию 09.01.2024.

Информация об авторах

Ярмоленко Максим Анатольевич – д.т.н., доцент
Цзян Сяо Хун – доктор наук, профессор
Рогачёв 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
Ярмоленко Ольга Альфредовна – старший преподаватель
Фролов Сергей Анатольевич – стажер мл.н.с.

ФИЗИКА

УДК 539.23; 537.311.3; 537.622
DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_57
EDN: QHXPQQ

СТЕПЕНЬ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В УСЛОВИЯХ ПОЛИТЕРМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА СТРОНЦИЙ-ЗАМЕЩЕННОГО ФЕРРОМОЛИБДАТА

М.В. Ярмолич[1], Н.А. Каланда[1], А.В. Петров[1], С.К. Лазарук[2], А.В. Семченко[3], Д. Сангаа[4], С. Мунхцэцэг[5]

[1]*НПЦ НАН Беларуси по материаловедению*, *Минск*
[2]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники*, *Минск*
[3]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[4]*Институт физики и технологии МАН*, *Улан-Батор*
[5]*Монгольский национальный университет*, *Улан-Батор*

DEGREE OF PHASE TRANSFORMATIONS UNDER CONDITIONS OF POLYTHERMAL SYNTHESIS OF STRONTIUM-SUBSTITUTED FERROMOLYBDATE

M.V. Yarmolich[1], N.A. Kalanda[1], A.V. Petrov[1], S.K. Lazarouk[2], A.V. Semchenko[3], D. Sangaa[4], S. Munkhtsetseg[5]

[1]*Scientific-Practical Materials Research Centre of the NAS of Belarus*, *Minsk*
[2]*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics*, *Minsk*
[3]*Francisk Skorina Gomel State University*
[4]*Institute of Physics and Technology of MAS*, *Ulanbaatar*
[5]*National University of Mongolia*, *Ulanbaatar*

Аннотация. Изучена последовательность фазовых превращений при кристаллизации $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ методом твердофазных реакций. Установлено, что для эффективного минимизирования влияния промежуточных продуктов реакции целесообразно применять прекурсоры и комбинированные режимы нагрева. В результате удалось получить однофазный порошок $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ с температурой Кюри 450 К и с величиной намагниченности 40,9 $А{\cdot}м^2{\cdot}кг^{-1}$ при T = 77 К в магнитном поле 0,86 Тл.

Ключевые слова: *твердый раствор ферромолибдата лантана-стронция*, *термогравиметрический анализ*, *рентгенофазовый анализ*, *скорость кристаллизации*, *последовательность и степень фазовых превращений*, *намагниченность*.

Для цитирования: *Степень фазовых превращений в условиях политермического синтеза стронций-замещенного ферромолибдата* / М.В. Ярмолич, Н.А. Каланда, А.В. Петров, С.К. Лазарук, А.В. Семченко, Д. Сангаа, С. Мунхцэцэг // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 57–62. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_57. – EDN: QHXPQQ

Abstract. The sequence of phase transformations during the crystallization of $Sr_{1.5}La_{0.5}FeMoO_{6-\delta}$ was investigated by the solid-phase reactions method. It has been established that in order to effectively minimize the influence of intermediate reaction products, it is advisable to use precursors and combined heating modes. As a result, it was possible to obtain the single-phase $Sr_{1.5}La_{0.5}FeMoO_{6-\delta}$ powder with the Curie temperature of 450 K and a magnetization value of 40.9 $A{\cdot}m^2{\cdot}kg^{-1}$ at T = 77 K in the magnetic field of 0.86 T.

Keywords: *lanthanum-strontium ferromolybdate solid solution*, *thermogravimetric analysis*, X-*ray phase analysis*, *crystallization rate*, *sequence and degree of phase transformations*, *magnetization.*

For citation: *Degree of phase transformations under conditions of polythermal synthesis of strontium-substituted ferromolybdate* / M.V. Yarmolich, N.A. Kalanda, A.V. Petrov, S.K. Lazarouk A.V. Semchenko, D. Sangaa, S. Munkhtsetseg // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 57–62. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_57 (in Russian). – EDN: QHXPQQ

Введение

Большой интерес специалистов в области спинтроники вызывают твердые растворы $Sr_{2-x}La_xFeMoO_{6-\delta}$ с упорядоченной структурой двойного перовскита. Эти материалы характеризуются высокой химической стабильностью в восстановительной атмосфере, имеют высокие значения температуры Кюри (420–470 К), выраженную спиновую поляризацию электронов проводимости (приближающуюся к 100%) и низкими значениями управляющих магнитных полей (B < 0,5 Тл) [1]–[4]. Интерес к таким материалам обусловлен их уникальными и важными для практических применений магнитными и магнитотранспортными свойствами, которые, однако, могут различаться в зависимости от способов их получения [4]–[8].

Важными условием для применения определенного магнитного материала в устройствах микроэлектроники является низкое удельное сопротивление и высокое значение температуры Кюри. В случае твердого раствора $Sr_{2-x}La_xFeMoO_{6-\delta}$ обнаружено, что увеличение содержания катионов лантана La^{3+}, который заменяет двухвалентный Sr^{2+}, приводит к увеличению концентрации электронов проводимости на уровне Ферми, и, согласно модели Рудермана – Кителя – Касуя – Иосиды [9]–[13]. Это обуславливает рост обменных взаимодействий, и, соответственно, увеличение T_C [9], [10]. Обнаружено, что наименьшим удельным сопротивлением обладает $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ [11]. Следует отметить, что дополнительное увеличение содержания La в составе материала приводит к ухудшению его гальваномагнитных свойств. Это объясняется наличием метастабильности магнитного состояния, вызванной одновременным сосуществованием ферромагнитных и антиферромагнитных взаимодействий [14], [15], что влияет на такие характеристики, как удельное сопротивление, намагниченность насыщения, температура Кюри и другие [9]–[13].

Важной проблемой в области спиновой электроники остается совершенствование технологии получения качественных образцов двойных перовскитов с воспроизводимыми магнитными и гальваномагнитными свойствами. Большое влияние на свойства двойных перовскитов оказывают антиструктурные (катион Fe на месте Mo и наоборот) и другие точечные дефекты (кислородные вакансии и их ассоциаты, межузельные дефекты, вакансии и т. д.) [16]–[19]. При образовании точечных дефектов в двойных перовскитах катионы железа могут находиться в различных спиновых состояниях: низкоспиновом $t_{2g}^6 e_g^0$, промежуточном $t_{2g}^5 e_g^1$ и высокоспиновом $t_{2g}^4 e_g^2$ [20]–[22]. Причем, при определенных термодинамических условиях может быть реализован случай, при котором имеется смесь высокого, промежуточного и низкого спинового состояний. Так, согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, в $Sr_{2-x}La_xFeMoO_{6-\delta}$ установлено совместное сосуществование как цепочечных фрагментов 30% (Fe^{3+} – Mo^{5+}), так и 70% (Fe^{2+} – Mo^{6+}) [23]–[25]. Из этого следует, что важнейшими для применения материала в промышленности свойствами можно управлять путем контроля концентрации точечных дефектов.

При анализе накопленных данных, полученных рядом авторов, установлена многостадийность процесса кристаллизации $Sr_{2-x}La_xFeMoO_{6-\delta}$, что обусловлено сложностью фазовых превращений, низкой кинетикой фазообразования и слабой подвижностью катионов Fe^{3+} и Mo^{5+} [26]–[30]. В публикациях есть сведения о получении двойных перовскитов механохимическим методом с последующим использованием высокотемпературного синтеза в восстановительной газовой среде [26]–[30]. В то же время в выполненных исследованиях практически отсутствуют строгие корреляции, связывающие функциональные характеристики материалов с их условиями получения. В этом случае, для формирования однофазного порошка $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ с воспроизводимыми физико-химическими свойствами, необходим контроль над процессами дефектообразования. Это требует анализа фазовых превращений, происходящих в шихте, и изучения кинетики степени превращения двойного перовскита в процессе его кристаллизации. В связи с этим, особую значимость приобретают исследования, направленные на изучение высокотемпературных фазовых превращений и определение состава промежуточных кристаллических фаз при синтезе $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$. В настоящей статье будет установлена корреляционная зависимость между скоростью фазовых превращений и степени фазового превращения ферромолибдата лантана-стронция, что позволит осуществить направленное изменение фазового состава синтезируемой керамики с воспроизводимыми физико-химическим свойствами.

1 Синтез, материалы и методы исследования

Для изучения последовательности фазовых превращений в твердых растворах $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ из прекурсоров $SrMoO_4$, $Sr_{0.5}La_{0.5}FeO_3$ использовались реактивы La_2O_3, Fe_2O_3 и MoO_3, а также карбонат стронция $SrCO_3$ марки «ОСЧ». Помол и перемешивание стехиометрической смеси исходных реагентов проводилось в планетарной шаровой мельнице типа «PM 100» производства фирмы Retsch GmbH (Германия) в жидкой среде (спирт) в течение 3 часов. Полученные смеси сушились при температуре 350 K и прессовались в таблетки. Отжиги смеси проводились в политермическом режиме при температурах 300–1370 K в потоке 5% H_2 / Ar с последующей закалкой при комнатной температуре.

Фазовый состав продуктов твердофазного синтеза определялся на дифрактометре PANalytical Empyrean в CuKα-излучении с использованием базы данных ICSD-PDF2 (Release 2000). Дифрактограммы снимались при комнатной температуре со скоростью 60 °/ч в диапазоне углов 2Θ = 10–90°. Аргон-водородная атмосфера создавалась постоянным потоком аргон-водородной смеси через высокотемпературную камеру AntonPaar HTK 1200N. Эксперименты выполнялись в диапазоне температур 290–1270 K со скоростью нагрева 10 град/мин. При этом каждая точка измерялась последовательно по 4 раза при достижении заданной температуры (время экспозиции

2,5 минуты). Количественно-фазовый состав продуктов твердофазного синтеза и степень сверхструктурного упорядочения определялись на основании данных рентгеновской дифракции (РФА) с использованием программного обеспечения POWDERCELL [31] методом Ритвельда.

Термическое поведение образцов исследовалось методом термогравиметрического анализа (ТГА) на дифференциальном сканирующем калориметре Setaram Labsys TG-DSC16 в потоке аргона при скорости нагрева 1,4 град / мин.

Температура Кюри определялась путем анализа температурных зависимостей намагниченности образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ пондеромоторным методом в диапазоне температур 77–800 К в приложенном магнитном поле 0,86 Тл, с использованием универсальной установки PPMS производства Cryogenic Ltd.

2 Результаты исследования и их обсуждение

На основании изучения последовательности фазовых превращений при кристаллизации $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ установлено, что синтез ферромолибдата лантан-стронция в смеси простых оксидов протекает через ряд последовательно-параллельных стадий (рисунок 2.1). На основании данных рентгеновской дифракции и ТГА обнаружено, что на начальном этапе взаимодействия образующийся твердый раствор ферромолибдата лантана-стронция обогащен железом и его состав в ходе реакции меняется в сторону увеличения содержания молибдена. В частности, при рассмотрении динамики фазовых превращений обнаружено, что основными сопутствующими фазами при кристаллизации твердого раствора двойного перовскита $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ являются $SrMoO_4$, $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ (рисунок 2.1).

Данное обстоятельство указывает, что эти соединения являются структурообразующими для твердого раствора ферромолибдата лантан-стронция. Становится очевидным, что для повышения скорости протекания физико-химических процессов необходимо уменьшение диффузионного пути движения исходных реагентов в реакционную зону за счет устранения промежуточных продуктов реакций при кристаллизации. Поэтому для ускорения процесса синтеза в качестве исходных реагентов использовались сложные оксиды $SrMoO_4$ и $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$. В результате использования прекурсоров удалось синтезировать однофазный ферромолибдат лантан-строн-ция без сверхструктурного упорядочения (рисунок 2.2) при $T = 1370$ К в потоке газовой смеси 5% H_2 / Ar в течение 40 часов, согласно следующей химической реакции:

$$SrMoO_4 + Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3 =$$
$$= Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta} + (0.5 + \delta / 2)O_2\uparrow.$$

При этом величина намагниченности (M) составляет 21,8 $А{\cdot}м^2{\cdot}кг^{-1}$ при $T = 77$ К в магнитном поле 0.86 Тл, а температура Кюри – 443 К (вставка на рисунке 2.2).

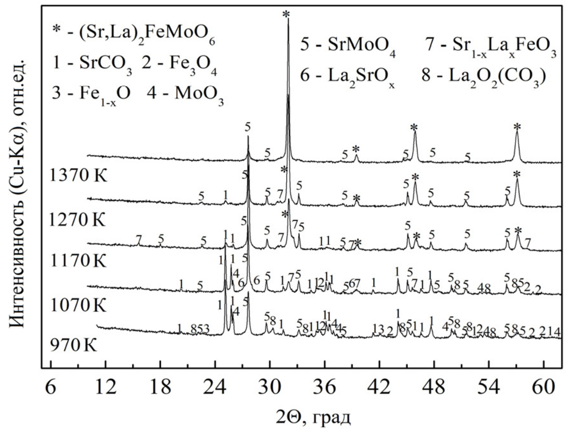


Рисунок 2.1 – Рентгенограммы образцов, синтезированных в непрерывном потоке 5% H_2 / Ar из стехиометрической смеси исходных реагентов $MoO_3 + 0,25La_2O_3 + 0,5Fe_2O_3 + 1,5SrCO_3$ при скорости нагрева 1,5 град / мин в диапазоне температур 300–1240 К с последующей их закалкой при комнатной температуре

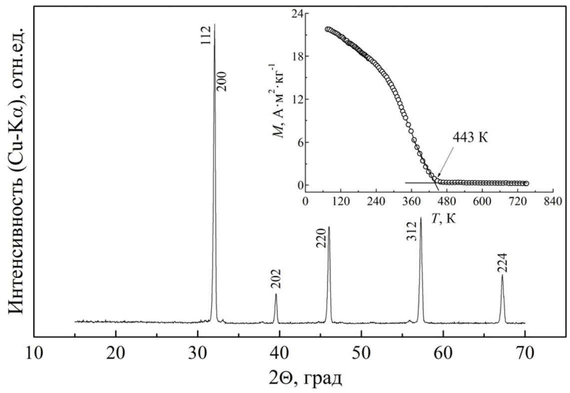
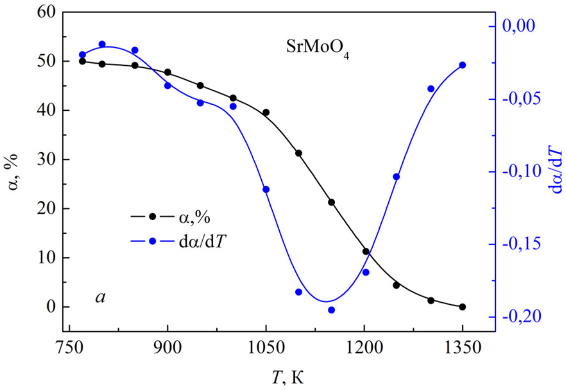


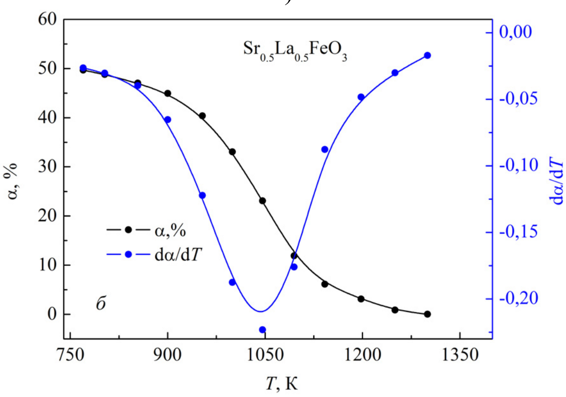
Рисунок 2.2 – Рентгеновская дифрактограмма однофазного образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$: синтезированного из прекурсоров $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и $SrMoO_4$ при $T = 1370$ К в потоке 5% H_2 / Ar в течение 40 часов. На вставке представлена температурная зависимость намагниченности полученного таким образом однофазного образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$

Для оптимизации режимов получения однофазного образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ со сверхструктурным упорядочением катионов Fe / Mo из прекурсоров были построены и проанализированы температурные зависимости степени фазовых превращений в процессе кристаллизации двойного перовскита (рисунки 2.3, 2.4).

Обнаружено, что с увеличением температуры нагрева выше 770 К наблюдается уменьшение амплитудного значения α_{max} для обоих соединений $SrMoO_4$ и $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$. Наличие более значительных кинетических трудностей при растворении $SrMoO_4$ подтверждают данные по температурам, при которых амплитудные значения производной степени превращения $(d\alpha / dT)_{min}$, указывающие на максимальную скорость растворения, на 100 К выше, чем для соединения $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$. При рассмотрении скоростей разложения оксидов замечено, что наибольшие значения минимума $(d\alpha / dT)_{min} = –0,23$ наблюдается для $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ при $T = 1049$ К, а для $SrMoO_4$ – $(d\alpha / dT)_{min} = 0,19$ при $T = 1150$ К (рисунок 2.3). Это указывает на более высокую скорость протекания химических процессов с растворением $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ по сравнению с ситуацией с молибдатом стронция (рисунок 2.3). На основании выше полученных данных следует, что для уменьшения процессов фазообразования и увеличения скорости разложения промежуточных продуктов реакции $SrMoO_4$ и $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ при кристаллизации твердого раствора $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ следует учитывать динамику фазовых превращений и применять комбинированные условия нагрева. Так, в низкотемпературной области, где осуществляется образование и рост двойных оксидов, скорость подъема температуры следует использовать максимальную, а в высокотемпературной, где наблюдается растворение образовавшихся побочных соединений, – низкую.



а)



б)

Рисунок 2.3 – Температурные зависимости степени превращения и их производные для соединений $SrMoO_4$ (*а*) и $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ (*б*)

Согласно данным анализа $\alpha = f(T)$ установлено, что при увеличении температуры степень превращения $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ увеличивается и при $T = 1370$ К достигает максимальных значений $\alpha = 100\%$ (рисунок 2.4). При этом в интервале температур $T \cong 1060–1140$ К наблюдается замедление скорости роста двойного перовскита с наличием $\min | (d\alpha / dT) |$ при 1100 К, обусловленное, скорее всего, уменьшением коэффициентов химической диффузии реагентов в реакционную зону (рисунок 2.4). Обнаруженное поэтапное изменение скорости роста $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ с присутствием двух максимумов $(\max | d\alpha / dT |)$ скорости изменения степени превращения функции вида $d\alpha / dt = f(T)$ при $T \cong 1040$ К и 1160 К совпадает с температурами максимального растворения $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и $SrMoO_4$, установленными выше.

В этом случае выявленный факт более быстрого вступления в реакцию $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ в области температур существования первого максимума $\max1|d\alpha/dT|$ скорости роста $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$, скорее всего, связан с реализацией такого механизма кристаллизации, при котором минимизируются кинетические трудности за счет интенсивного растворения $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$, что приводит к увеличению скорости роста двойного перовскита. Такой же химический процесс при кристаллизации магнетика реализуется в области температур существования второго максимума $\max2 | d\alpha / dT |$ скорости роста $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$, только теперь за счет интенсивного растворения $SrMoO_4$. При этом скорость всего превращения определятся скоростью взаимодействия реагентов на границе раздела с зернами $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$.

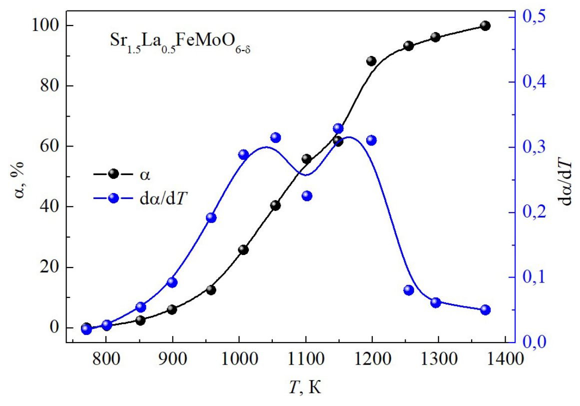


Рисунок 2.4 – Температурные зависимости степени превращения и ее производной для соединения $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$

На основании выше полученных данных для получения однофазного твердого раствора были оптимизированы комбинированные режимы нагрева:

– на первом этапе производился предварительный синтез при $T = 1050$ К в течение 20 часов. Данная температура была выбрана в связи с тем, что при ее значении наблюдается $\min| (d\alpha / dT) |$ для соединения $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$, а также $\max| (d\alpha / dT) |$ для твердого раствора $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$;

– на втором этапе, для увеличения реакционной способности смеси и диффузионной подвижности реагентов, измельчался образовавшийся слой продукта реакции, гомогенизировался и высокая дисперсность шихты достигалась путем тонкого вибропомола в спирту в течение 2 часов;

– на третьем этапе, с целью максимально быстрого разложения промежуточных фаз $SrMoO_4$ и $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и достижения значений степени превращения $\alpha = 100\%$ для $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$, синтез осуществлялся при $T = 1050$ К в течение 5 часов, с последующим нагревом до $T = 1150$К, так как в таких условиях были достигнуты максимальные скорости изменения степени превращения двойного перовскита.

В результате использования комбинированных режимов синтеза удалось получить однофазное соединение $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ с наличием сверхструктурного упорядочения катионов железа и молибдена, на что указывают рентгеновские рефлексы (101) и (103) (рисунок 2.5).

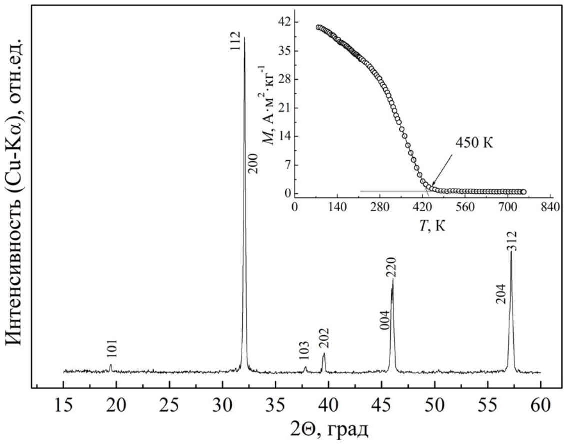


Рисунок 2.5 – Рентгеновская дифрактограмма образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$, синтезированного из прекурсоров $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и $SrMoO_4$ при комбинированных режимах отжига и закаленного при комнатной температуре. На вставке представлена температурная зависимость намагниченности полученного образца $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$

При этих условиях синтеза величина намагниченности составляет 40,9 $А{\cdot}м^2{\cdot}кг^{-1}$ при $T = 77$ К в магнитном поле 0,86 Тл, а температура Кюри – 450 К (вставка на рисунке 2.5).

Заключение

На основании изучения последовательности фазовых превращений при кристаллизации твердого раствора $Sr_{2-x}La_xFeMoO_{6-\delta}$ определена многостадийность процесса, что обусловлено сложностью фазовых превращений из-за протекания последовательно-параллельных химических реакций и низкой кинетики фазообразования. Установлено, что для минимизации кинетических трудностей и увеличения скорости роста однофазного ферромолибдата лантана-стронция в качестве исходных реагентов необходимо использовать прекурсоры $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и $SrMoO_4$. На основании изучения температурных зависимостей степени фазовых превращений и их производных были оптимизированы комбинированные режимы нагрева. В результате использования комбинированных режимов синтеза удалось получить однофазное соединение $Sr_{1,5}La_{0,5}FeMoO_{6-\delta}$ из прекурсоров $Sr_{0,5}La_{0,5}FeO_3$ и $SrMoO_4$ с температурой Кюри 450 К, величиной намагниченности 40,9 $А{\cdot}м^2{\cdot}кг^{-1}$ при $T = 77$ К в магнитном поле 0,86 Тл и с наличием сверхструктурного упорядочения катионов железа и молибдена (82%).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Serrate*, *D.* Double perovskites with ferromagnetism above room temperature / D. Serrate, J.M. De Teresa, M.R. Ibarra / Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – Vol. 19. – P. 1–86.

2. *Hemery*, *E.* Magnetic and transport studies of strongly correlated perovskite ceramics: Thesis of Doctor of Philosophy in Physics: 2007 / E. Hemery. – Wellington, 2007. – 84 p.

3. *Room-temperature magnetoresistance in an oxide material with an ordered double-perovskite structure* / K.-I. Kobayashi, T. Kimura, H. Sawada, K. Terakura, Y. Tokura / Nature. – 1998. – Vol. 395. – P. 677–680.

4. *Effect of La doping on magnetotransport and magnetic properties of double perovskite* Sr_2FeMoO_6 *system* / G.N. Rao, S. Roy, C.-Y. Mou, J.W. Chen // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2006. – Vol. 299, № 2. – P. 348–355.

5. Sr_2FeMoO_6 *nanosized compound with dielectric sheaths for magnetically sensitive spintronic devices* / N. Kalanda, D.-H. Kim, S. Demyanov, S.-C.Yu, M. Yarmolich, A. Petrov, S.K. Oh // Current Applied Physics. – 2018. – Vol. 18, № 1. – P. 27–33.

6. *Functional multicomponent metal oxide films based on* Sr, Sn, Fe *and* Mo *in the anodic alumina matrixes* / G.G. Gorokh, A.I. Zakhlebayeva, A.A. Lazavenka, N.A. Sobolev, V.V. Zhylinski, N.V. Bogomazova, M.V. Yarmolich, N.A. Kalanda // Phys. Status Solidi B. – 2020. – Vol. 257, № 3. – P. 1900283.

7. *Double perovskite* Sr_2FeMoO_6 *films prepared by electrophoretic deposition* / L.V. Kovalev, M.V. Yarmolich, M.L. Petrova, J. Ustarroz, H.A. Terryn, N.A. Kalanda // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2014. – Vol. 6. – P. 19201–19206.

8. *Cobalt-free* $La_{0,5}Sr_{0,5}Fe_{0,9}Mo_{0,1}O_{3-\delta}$ *electrode for symmetrical SOFC running on* H_2 *and* CO *fuels* / H. Cai, L. Zhang, J. Xu, J. Huang, X. Wei, L. Wang, Z. Song, W.Long // Electrochimica Acta. – 2019. – Vol. 320. – P. 134642.

9. *Curie temperature enhancement in the double perovskite* $Sr_{2-x}La_xFeMoO_6$ *system: an experimental study* / B. Agiular, T.E. Soto, J. de la Torre Medina // Physica B: Condensed Matter. – 2019. – Vol. 556. – P. 108–113.

10. *Stöhr*, *J.* Magnetism: from fundamentals to nanoscale dynamics / J. Stöhr, H.C. Siegmann. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2006. – 820 p.

11. *Effect of La doping on the properties of* $Sr_{2-x}La_xFeMoO_6$ *double perovskite* / A. Kahoul, A. Aziz, S. Colis, D. Stoelfer, R. Moubah, G. Schmerber, C. Leuvrey, A. Dinia // Journal of Applied Physics. – 2008. – Vol. 104. – P. 123903.

12. *Curie temperature enhancement in partially disordered* Sr_2FeReO_6 *double perovskites* / M. Retuerto, M.J. Martinez-Lope, M. Garcia-Hernandez, J.A. Alonso // Mater. Res. Bull. – 2009. – Vol. 44. – P. 1261–1264.

13. *Increase of Curie temperature with La doping in the double perovskite* $Sr_{2-y}La_yFeMoO_6$ *within an electronic correlation approach* / F.E. Chavez, E.J. Guzman, B. Aguilar, O. Navarro, M. Avignon // Revista Mexicana de Física. – 2018. – Vol. 64, № 2. – P. 145–149.

14. *Signature of an antiferromagnetic metallic ground state in heavily electron-doped* Sr_2FeMoO_6 / S. Jana, C. Meneghini, P. Sanyal, S. Sarkar, T. Saha-Dasgupta, O. Karis, S. Ray // Physical Review B. – 2012. – Vol. 86. – P. 054433.

15. *Sanyal*, *P.* Evidence of kinetic-energy-driven antiferromagnetism in double perovskites: a first-principles study of La-doped Sr_2FeMoO_6 / P. Sanyal, H. Das, T. Saha-Dasgupta // Physical Review B. – 2009. – Vol. 80, № 22. – P. 224412.

16. *Cationic ordering control of magnetization in* Sr_2FeMoO_6 *double perovskite* / Ll. Balcells, J. Navarro, M. Bibes, A. Roig, B. Martinez, J. Fontcuberta // Applied Physics Letters. – 2001. – Vol. 78, № 6. – P. 781–783.

17. *Effect of disorder on the electronic structure of the double perovskite* Sr_2FeMoO_6 / R. Allub, O. Navarro, M. Avignon, B. Alascio // Physica B: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 320, № 1. – P. 13–17.

18. *Correlation between anti-site disorder and magnetic properties in ordered perovskite* Sr_2FeMoO_6 / B. Park, H. Han, J. Kim, Y.J. Kim, C.S. Kim, B.W. Lee // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2004. – Vols. 272–276. – P. 1851–1852.

19. *Charge transfer and disorder in double perovskites* / N. Menéndez, M. Garcia-Hernandez, D. Sanchez, J.D. Tornero, J.L. Martinez, J.A. Alonso // Chemistry of Materials. – 2004. – Vol. 16. – P. 3565–3572.

20. *Sarma*, *D.D.* A new class of magnetic materials: Sr_2FeMoO_6 and related compounds / D.D. Sarma // Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2001. – Vol. 5. – P. 261–268.

21. *Electronic structure of half-metallic double perovskites* / Z. Szotek, W.M. Temmerman, A. Svane, L. Petit, H. Winter // Physical Review B. – 2003. – Vol. 68. – P. 104411.

22. *Electronic Structure of* Sr_2FeMoO_6 / D.D. Sarma, P. Mahadevan, T. Saha-Dasgupta, S. Ray, A. Kumar // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 85, № 12. – P. 2549–2552.

23. *Evidence for valence fluctuation of* Fe *in* Sr_2FeMoO_{6-w} *double perovskite* / J. Lindén, T. Yamamoto, M. Karppinen, H. Yamauchi, T. Pietari // Applied Physics Letters. – 2000. – Vol. 76, № 20. – P. 2925–2927.

24. *Bulk-sensitive photoemission spectroscopy of* A_2FeMoO_6 *double perovskites* (A = Sr, Ba) / J.-S. Kang, J.H. Kim, A. Sekiyama, S. Kasai, S. Suga, S.W. Han, K.H. Kim, T. Muro, Y. Saitoh, C. Hwang, C.G. Olson, B.J. Park, B.W. Lee, J.H. Shim, J.H. Park, B.I. Min // Physical Review B. – 2002. – Vol. 66. – P. 113105.

25. *Charge ordering and magnetic properties in nanosized* $Sr_2FeMoO_{6-\delta}$ *powders* / M. Yarmolich, N. Kalanda, S. Demyanov, Ju. Fedotova, V. Bayev, N. Sobolev // Physica Status Solidi B. – 2016. – Vol. 253, № 11. – P. 2160–2166.

26. *Effect of preparation procedure on the magnetic and transport properties of double perovskite* Sr_2FeMoO_6 / W. Jin-Hui, Y. Zhi, L. Gong-Qiang, D. You-Wei // Chin. Phys. Soc. – Vol. 13, № 1. – P. 90–94.

27. *Fang*, *T.-T.* Formation kinetics of Sr_2FeMoO_6 double perovskite / T.-T. Fang, J.-C. Lin // Journal of Materials Science. – 2005. – Vol. 40. – P. 683– 686.

28. *Влияние условий синтеза на структурные и магнитотранспортные свойства* $Sr_2FeMoO_{6-\delta}$ / Н.А. Каланда, М.В. Ярмолич, А.М. Панасевич, Д.А. Кривченя // Известия НАН Беларуси (серия физ.-мат. наук). – 2015. – № 2. – С. 82–85.

29. *Characterization of ferromagnetic double perovskite* Sr_2FeMoO_6 *prepared by various methods* / M. Cernea, F. Vasiliu, C. Bartha, C. Plapcianu, I. Merconiu // Ceramics International. – 2014. – Vol. 40. – P. 11601–11609.

30. *Influence of successive sintering treatments on high ordered* Sr_2FeMoO_6 *double perovskite properties* / B. Jurca, J. Berthon, N. Dragoe, P. Berthet // Journal of Alloys and Compounds. – 2009. – Vol. 474. – P. 416–423.

31. *Kraus*, *W.* POWDER CELL – a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns / W. Kraus, G. Nolze // Journal of Applied Crystallography. – 1996. – Vol. 29, № 3. – P. 301–303.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проекты Ф23МЭ-025, Ф24В-005 и Ф24МН-009.

Поступила в редакцию 16.01.2024.

Информация об авторах

Ярмолич Марта Викторовна – к.ф.-м.н., доцент
Каланда Николай Александрович – д.ф.-м.н., доцент
Петров Александр Владимирович – к.ф.-м.н., доцент
Лазарук Сергей Константинович – д.ф.-м.н., профессор
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Сангаа Делег – д.ф.-м.н., профессор
Мунхцэцэг Самбуу – к.ф.-м.н., доцент

МАТЕМАТИКА

УДК 512.542

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_63
EDN: NMFTFX

КОНЕЧНЫЕ ГРУППЫ С НАСЛЕДСТВЕННО G-ПЕРЕСТАНОВОЧНЫМИ ПОДГРУППАМИ МАЛОГО ПОРЯДКА

П.В. Бычков[1], **С.Ф. Каморников**[1], **В.Н. Тютянов**[2]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*Международный университет «МИТСО», Гомель*

FINITE GROUPS WITH HEREDITARILY G-PERMUTABLE SUBGROUPS OF SMALL ORDER

P.V. Bychkov[1], **S.F. Kamornikov**[1], **V.N. Tyutyanov**[2]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*Gomel Branch of International University «MITSO», Gomel*

Аннотация. Исследуется строение конечной группы G, все подгруппы которой порядка 2 и 3, а также все циклические подгруппы порядка 4 являются наследственно G-перестановочными в G.

Ключевые слова: *конечная группа*, *наследственно G-перестановочная подгруппа*, *разрешимая группа*.

Для цитирования: *Бычков*, *П.В.* Конечные группы с наследственно G-перестановочными подгруппами малого порядка / П.В. Бычков, С.Ф. Каморников, В.Н. Тютянов // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 63–67. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_63. – EDN: NMFTFX

Abstract. The structure of a finite group G is investigated, in which all subgroups of order 2 and 3 as well as all cyclic subgroups of order 4 are hereditarily G-permutable in G.

Keywords: *finite group*, *hereditarily G-permutable subgroup*, *soluble group.*

For citation: *Bychkov*, *P.V.* Finite groups with hereditarily G-permutable subgroups of small order / P.V. Bychkov, S.F. Kamornikov, V.N. Tyutyanov // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 63–67. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_63 (in Russian). – EDN: NMFTFX

Введение

Все группы, которые мы рассматриваем в данной работе, являются конечными.

Следующая концепция, развивающая понятие *квазиперестановочной подгруппы* (см. [1]), т. е. подгруппы, перестановочной со всеми подгруппами группы, предложена в работе [2].

***Определение* 1.** Пусть A, B – подгруппы группы G. Тогда A называется:

(1) *G-перестановочной* с B, если $AB^x = B^x A$ для некоторого $x \in G$;

(2) *наследственно G-перестановочной* с B, если $AB^x = B^x A$ для некоторого элемента $x \in < A, B >$.

***Определение* 2.** Подгруппа A группы G называется (*наследственно*) *G-перестановочной* в G, если A (наследственно) G-перестановочна со всеми подгруппами из G.

Наследственно G-перестановочные подгруппы в последнее время нашли ряд интересных приложений, связанных с изучением нормальной структуры конечной группы и получением критериев ее не простоты [3]–[8].

В частности, в [3], [4], отвечая на вопрос о существовании G-перестановочных и наследственно G-перестановочных подгрупп в неабелевых простых группах (см. вопрос 17.112 из «Коуровской тетради» [9]), А.А. Гальт и В.Н. Тютянов показали, что спорадические и исключительные группы лиева типа не содержат нетривиальных наследственно G-перестановочных подгрупп.

В [5] доказана разрешимость группы, у которой все минимальные подгруппы являются наследственно G-перестановочных (под *минимальной подгруппой* группы G понимается любая ее подгруппа простого порядка).

В [6] доказано, что если S – силовская 2-подгруппа группы G и каждая максимальная подгруппа из S является наследственно G-перестановочной в G, то G разрешима.

В работах [7], [8] исследовано нормальное и формационное строение группы, у которой любая подгруппа Шмидта является наследственно G-перестановочной (*подгруппой Шмидта* называется ненильпотентная группа, все собственные подгруппы которой являются нильпотентными).

В данной работе развиваются результаты из [5]. Здесь исследуется строение группы, у которой все подгруппы порядка 2 и 3, а также все циклические подгруппы порядка 4 являются наследственно G-перестановочными.

Наша главная цель – доказательство следующей теоремы.

***Теорема* А.** *Пусть G – группа, у которой все подгруппы порядка* 2 *и* 3, *а также все циклические подгруппы порядка* 4 *являются наследственно G-перестановочными. Тогда G – $\{2,3\}$-сверхразрешимая группа.*

Напомним, что для множества π простых чисел группа G называется π*-сверхразрешимой*, если она обладает главным рядом, каждый фактор которого либо является π'-группой, либо имеет простой порядок p для некоторого $p \in \pi$.

Из теоремы А, в частности, следует, что если G – $3'$-группа, у которой все подгруппы порядка 2, а также все циклические подгруппы порядка 4 являются наследственно G-перестановочными, то G 2-сверхразрешима.

1 Определения и предварительные результаты

В данной работе мы используем определения и обозначения, которые приняты в книге [10].

Будем использовать следующие обозначения:

– если p – простое число, то $Syl_p(G)$ – множество всех силовских p-подгрупп группы G;

– $\Phi(G)$ – подгруппа Фраттини группы G;

– $Z(G)$ – центр группы G;

– Z_n – циклическая группа порядка n;

– если A и B – подгруппы группы G, то $A:B$ – их полупрямое произведение.

Доказательство следующего результата осуществляется простой проверкой.

***Лемма* 1.1.** *Пусть H и K – подгруппы группы G, причем K нормальна в G. Если подгруппа H является наследственно G-перестановочной в G, то подгруппа HK/K является наследственно G/K-перестановочной в G/K.*

Минимальная неразрешимая группа – это неразрешимая группа, все собственные подгруппы которой разрешимы. Простая проверка показывает, что группа G является минимальной неразрешимой группой тогда и только тогда, когда $G/\Phi(G)$ – *минимальная простая группа*, т. е. неабелева простая группа, все собственные подгруппы которой разрешимы. Полный список минимальных простых групп приведен Томпсоном в [11]. Этот список содержит следующие группы:

– $PSL_2(2^p)$, где p – простое число;

– $PSL_2(3^p)$, где p – простое число, большее 3;

– $PSL_2(p)$, где p – простое число, большее 5, и $p^2+1 \equiv 0 \pmod 5$;

– $PSL_3(3)$;

– $Sz(2^p)$, p – простое нечетное число.

Будем использовать следующий результат.

***Лемма* 1.2** [5, лемма 3]. *Пусть G – минимальная простая группа. Тогда G не содержит нетривиальных наследственно G-перестановочных подгрупп.*

***Предложение* 1.1.** *Пусть G – $3'$-группа, у которой все подгруппы порядка* 2 *и все циклические подгруппы порядка* 4 *являются наследственно G-перестановочными. Тогда группа G разрешима.*

Доказательство. Пусть группа G – минимальный контрпример к предложению. Если собственная подгруппа группы G имеет нечетный порядок, то она разрешима по теореме Томпсона-Фейта; если же она имеет четный порядок, то она неразрешима, поскольку G является минимальным контрпримером к предложению. Следовательно, G – минимальная неразрешимая группа. Если G является простой неабелевой группой, то она будет минимальной простой группой и $G \cong Sz(2^p)$ для некоторого простого числа $p \geq 3$. Данный случай невозможен ввиду леммы 1.2.

Таким образом, G не является простой неабелевой группой. Легко показать, что $G/\Phi(G)$ – минимальная простая неабелева $3'$-группа. Таким образом, $G/\Phi(G) \cong Sz(2^p)$ для некоторого простого числа $p \geq 3$. Согласно леммам 1.1 и 1.2, все элементы группы G, имеющие порядок 2 и 4, содержатся в подгруппе $\Phi(G)$.

Пусть $x \in \Phi(G)$ и $|x| = 2$. Тогда ввиду условия предложения для некоторых силовских подгрупп $U \in Syl_t(G)$ и $S \in Syl_s(G)$, где $t \in \pi(q-\sqrt{2q}+1)$ и $s \in \pi(q+\sqrt{2q}+1)$, существуют подгруппы $<x>U$ и $<x>S$. Так как подгруппа $\Phi(G)$ нильпотентна, то подгруппа $R \in Syl_2(\Phi(G))$ нормальна в G. Отсюда следует, что

$$<x>S \cap R = <x>U \cap R = <x>.$$

Поэтому $<x>S = <x>:S = <x>\times S$ и $<x>U = <x>:U = <x>\times U$. Если $<S,U>$ – собственная подгруппа группы G, то $<S,U>$ является разрешимой группой. Тогда группа $G/\Phi(G) \cong Sz(2^p)$ содержит собственную разрешимую подгруппу

$$<S\Phi(G)/\Phi(G), U\Phi(G)/\Phi(G)>,$$

где

$$U\Phi(G)/\Phi(G) \in Syl_t(G/\Phi(G))$$

и $S\Phi(G)/\Phi(G) \in Syl_s(G/\Phi(G))$. Последнее невозможно ввиду строения группы $Sz(2^p)$ (см., например, [12]).

Таким образом, $< S,U >= G$ и $x \in Z(G)$. Поскольку $< x >$ – произвольный элемент порядка 2, то все элементы группы *G*, имеющие порядок 2, содержатся в $Z(G)$.

Пусть $x \in \Phi(G)$ такой, что $|x|=4$. Так же как в случае $|x|=2$ показывается, что $< x > \lhd G =< S,U >$. Ввиду [13, лемма 5.4.1] $x \in Z(G)$. Так как *x* – произвольный элемент порядка 4, то все элементы группы *G*, имеющие порядок 4, содержатся в $Z(G)$.

Таким образом, все элементы порядка 2 и 4 группы *G* содержатся в $Z(G)$. Ввиду [14, теорема IV.5.5] группа *G* является 2-нильпотентной, что невозможно.

Предложение доказано.

При доказательстве теоремы A мы будем опираться на следующий результат из [15].

***Лемма* 1.3.** *Пусть p и q – простые числа, m и n – натуральные числа, причем* $p^m = q^n + 1$. *Тогда выполняется одно из следующих утверждений:*

1) $q=2$, $p=3$, $n=3$ *и* $m=2$;

2) $q=2$, $m=1$, *n является степенью числа* 2, *а* p^n+1 *– простое число Ферма*;

3) $p=2$, $n=1$ *и* $q=p^m-1$ *– простое число Мерсенна, в частности, m является простым числом.*

Описание подгрупп группы $PSL_2(p)$ содержится в известной теореме Диксона (см., например, [14, теорема II.8.27]). В дальнейшем мы будем опираться на нее без дополнительных ссылок.

2 Доказательство теоремы A

Покажем сначала, что группа *G* является разрешимой. Предположим, что это не так и *G* – минимальный контрпример. Ввиду предложения 1.1 будем считать, что 3 делит порядок группы *G*. Ясно, что *G* – минимальная неразрешимая группа. Более того, ввиду леммы 1.2 мы можем считать, что *G* не является простой неабелевой группой. Следовательно, $\Phi(G) \neq 1$ и $G/\Phi(G)$ – минимальная простая группа. Согласно леммам 1.1 и 1.2, все элементы группы *G* порядков 2, 3 и 4 содержатся в подгруппе $\Phi(G)$. Рассмотрим все возможные случаи.

1. $G/\Phi(G) \cong PSL_2(2^p)$, где *p* – простое число.

Из теоремы Диксона следует, что в группе $PSL_2(2^p) = PSL_2(q)$ силовская 2-подгруппа *U* содержится в единственной максимальной подгруппе $B \cong q:(q-1)$. Кроме того, $PSL_2(q)$ содержит циклическую подгруппу $T \cong Z_{q+1}$. При этом числа q, $q-1$, $q+1$ являются попарно взаимно простыми. Ввиду леммы 1.3 равенство $2^p+1=3^m$ имеет место только в случае $p=3$ и $m=2$ для группы $PSL_2(2^3)$. В оставшихся случаях имеется простой делитель *s* числа $q+1$, отличный от 3. Пусть $S \in Syl_s(PSL_2(2^p))$. В силу изложенного имеем $< U,S >= PSL_2(2^p)$.

Пусть сначала $p \neq 3$. Рассмотрим элемент $x \in \Phi(G)$ такой, что $|x|=3$. Тогда ввиду условия теоремы для некоторых подгрупп $U \in Syl_2(G)$ и $S \in Syl_s(G)$, где $s \in \pi(2^p+1)\setminus\{3\}$, существуют подгруппы $< x > S$ и $< x > U$. Так как подгруппа $\Phi(G)$ нильпотентна, то подгруппа $R \in Syl_3(\Phi(G))$ нормальна в *G*. Отсюда следует, что

$$< x > S \cap R =< x > U \cap R =< x >.$$

Поэтому $< x > S =< x >: S$ и $< x > U =< x >: U$. Если $< S,U >$ – собственная подгруппа группы *G*, то $< S,U >$ является разрешимой группой. Тогда группа $G/\Phi(G) \cong PSL_2(2^p)$ содержит собственную разрешимую подгруппу

$$< S\Phi(G)/\Phi(G), U\Phi(G)/\Phi(G) >,$$

где $U\Phi(G)/\Phi(G) \in Syl_2(G/\Phi(G))$ и $S\Phi(G)/\Phi(G) \in Syl_s(G/\Phi(G))$. Последнее невозможно ввиду строения группы $PSL_2(2^p)$.

Таким образом, $< S,U >= G$ и подгруппа $< x >$ нормальна в *G*. Следовательно, для любого элемента $z \in G$ порядка 3 подгруппа $< z >$ нормальна в *G*. Ясно, что $< z > \subseteq Z(R)$. Поэтому $\Phi(G) \subseteq C_G(< z >)$. Так как подгруппа $C_G(< z >)$ является нормальной в *G*, то $C_G(< z >) = G$ и $z \in Z(G)$. Поскольку *z* – произвольный элемент порядка 3, то все элементы группы *G*, имеющие порядок 3, содержатся в $Z(G)$. Ввиду теоремы IV.3.5 из [14] группа *G* является 3-нильпотентной, что невозможно.

Пусть теперь $G/\Phi(G) \cong PSL_2(8)$. Отметим, что в группе $PSL_2(8)$ порядка $2^3 \cdot 3^2 \cdot 7$ силовская 7-подгруппа *S* и силовская 3-подгруппа *T* порождают $PSL_2(8)$.

Пусть $x \in \Phi(G)$ такой, что $|x|=2$. Тогда ввиду условия теоремы для некоторых подгрупп $U \in Syl_7(G)$ и $S \in Syl_3(G)$ существуют подгруппы $< x > S$ и $< x > U$. Так как подгруппа $\Phi(G)$ нильпотентна, то подгруппа $R \in Syl_2(\Phi(G))$ нормальна в *G*. Отсюда следует, что

$$< x > S \cap R =< x > U \cap R =< x >.$$

Поэтому $< x > S =< x >: S =< x > \times S$ и

$$< x > U =< x >: U =< x > \times U.$$

Так как $< S,U >= G$, то $x \in Z(G)$. Поскольку *x* – произвольный элемент порядка 2, то все элементы группы G, имеющие порядок 2, содержатся в $Z(G)$.

Пусть $x \in \Phi(G)$ такой, что $|x| = 4$. Так же как в случае $|x| = 2$ показывается, что $< x > \lhd G = < S, U >$. Ввиду [13, лемма 5.4.1] $x \in Z(G)$. Так как x – произвольный элемент порядка 4, то все элементы группы G, имеющие порядок 4, содержатся в $Z(G)$.

Таким образом, все элементы порядка 2 и 4 группы G содержатся в $Z(G)$. Ввиду [14, теорема IV.5.5] группа G является 2-нильпотентной, что невозможно.

2. $G / \Phi(G) \cong PSL_2(p)$, где p – простое число, большее 5, и $p^2 + 1 \equiv 0 \pmod 5$ или $G / \Phi(G) \cong PSL_2(3^p)$, где p – простое число, большее 3.

Рассмотрим элемент $x \in \Phi(G)$ такой, что $|x| = 3$. Тогда из строения группы $G / \Phi(G)$ следует, что $G = < U, S >$, где $U \in Syl_2(G)$ и $S \in Syl_s(G)$ для некоторого простого s, большего 3. Рассуждая далее по аналогии с описанным в пункте 1 случаем, получаем, что все элементы группы G, имеющие порядок 3, содержатся в $Z(G)$. Ввиду теоремы IV.3.5 из [14] группа G является 3-нильпотентной, что невозможно.

3. $G / \Phi(G) \cong PSL_3(3)$.

Из [15] следует, что в группе $PSL_3(3)$ силовская 13-подгруппа S и силовская 3-подгруппа T порождают группу $PSL_3(3)$. Далее по аналогии с описанным в пункте 1 случаем $G / \Phi(G) \cong PSL_2(8)$ приходим к противоречию.

Итак, G – разрешимая группа. Покажем теперь, что любая группа, удовлетворяющая условиям теоремы, является π-сверхразрешимой, где $\pi = \{2, 3\}$.

Предположим, что это не так. Тогда существует по крайней мере одна группа, которая не является π-сверхразрешимой, но все ее подгруппы порядка 2 и 3, а также все ее циклические подгруппы порядка 4 являются наследственно G-перестановочными. Выберем среди них группу G, имеющую наименьший порядок. Пусть M – ее произвольная максимальная подгруппа. Тогда из $|M| < |G|$ и выбора группы G следует, что M – π-сверхразрешимая группа. Так как группа G не является π-сверхразрешимой, то G – минимальная не **F**-группа, где **F** – формация всех π-сверхразрешимых групп.

Так как группа G является разрешимой, то ввиду теоремы 24.2 из [16] она обладает следующими свойствами:

1) $G^{\mathbf{F}}$ является p-группой, где $p \in \{2, 3\}$;

2) $G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})$ – нециклический главный фактор группы G;

3) $\Phi(G^{\mathbf{F}}) = G^{\mathbf{F}} \cap \Phi(G) \subseteq Z(G^{\mathbf{F}})$;

4) если группа $G^{\mathbf{F}}$ неабелева, то ее центр, коммутант и подгруппа Фраттини совпадают и имеют экспоненту p;

5) если группа $G^{\mathbf{F}}$ абелева, то она элементарна;

6) если $p = 3$, то $G^{\mathbf{F}}$ имеет экспоненту 3; если $p = 2$, то экспонента $G^{\mathbf{F}}$ не превышает 4.

Если $p = 3$, то из 6) следует, что в $G^{\mathbf{F}}$ найдется элемент x порядка 3, который не лежит в $\Phi(G^{\mathbf{F}})$. Тогда ввиду утверждения 2) $< x > \Phi(G^{\mathbf{F}}) / \Phi(G^{\mathbf{F}})$ – собственная подгруппа группы $G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})$, имеющая порядок 3. Пусть $M / \Phi(G^{\mathbf{F}})$ – максимальная подгруппа группы $G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})$, не содержащая $G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})$. Очевидно,

$$|G : M| = |G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})| = 3^n,$$

при этом ввиду утверждения 2) $n > 1$. По лемме 1.1 $< x > \Phi(G^{\mathbf{F}}) / \Phi(G^{\mathbf{F}})$ – наследственно $G / \Phi(G^{\mathbf{F}})$-перестановочная подгруппа в $G / \Phi(G^{\mathbf{F}})$. Поэтому в G найдется элемент y такой, что $< x > M^y = M^y < x >$. Из максимальности M в G следует, что $< x > M^y = G$, а значит, $|G : M| = 3$. Противоречие.

Если $p = 2$, то из 4)–6) следует, что в $G^{\mathbf{F}}$ найдется по крайней мере один элемент x порядка 2 или 4, который не лежит в $\Phi(G^{\mathbf{F}})$. Тогда ввиду утверждения 2) $< x > \Phi(G^{\mathbf{F}}) / \Phi(G^{\mathbf{F}})$ – собственная подгруппа группы $G^{\mathbf{F}} / \Phi(G^{\mathbf{F}})$, имеющая порядок 2. Рассуждая далее по аналогии со случаем $p = 3$, снова приходим к противоречию, которое и завершает доказательство теоремы. □

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ore*, *O.* Contributions in the theory of groups of finite order / O. Ore // Duke Math. J. – 1939. – Vol. 5. – P. 431–460.

2. *Го*, *В.* *X*-перестановочные подгруппы / В. Го, А.Н. Скиба, К.П. Шам // Сибирский математический журнал. – 2007. – Т. 48, № 4. – С. 742–759.

3. *Гальт*, *А.А.* О существовании *G*-перестановочных подгрупп в простых спорадических группах / А.А. Гальт, В.Н. Тютянов // Сибирский математический журнал. – 2022. – Т. 63, № 4. – С. 831–841.

4. *Гальт*, *А.А.* О существовании *G*-перестановочных подгрупп в исключительных группах

G лиева типа / А.А. Гальт, В.Н. Тютянов // Сибирский математический журнал. – 2023. – Т. 64, № 5. – С. 935–945.

5. *Каморников*, *С.Ф.* Конечные группы с наследственно *G*-перестановочными минимальными подгруппами / С.Ф. Каморников, В.Н. Тютянов // Труды Института математики и механики УрО РАН. – 2023. – Т. 29, № 1. – С. 102–110.

6. *Каморников*, *С.Ф.* О разрешимости и сверхразрешимости конечных групп / С.Ф. Каморников, В.Н. Тютянов // Сибирский математический журнал. – 2023. – Т. 64, № 2. – С. 312–320.

7. *Finite groups with G-permutable Schmidt subgroups* / A. Ballester-Bolinches, S.F. Kamornikov, V. Pérez-Calabuig, V.N. Tyutyanov // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2023. – Vol. 20. – Article 174. – P. 1–12.

8. *Finite groups with hereditarily G-permutable Schmidt subgroups* / A. Ballester-Bolinches, S.F. Kamornikov, V. Pérez-Calabuig, V.N. Tyutyanov // Bull. Austral. Math. Soc. – 2023. – P. 1–7. – DOI: doi.org/10.1017/S0004972723000771.

9. *The Kourovka Notebook*: *Unsolved problems in group theory*. – Novosibirsk: Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2022. – 269 p.

10. *Doerk*, *K.* Finite soluble groups / K. Doerk, T. Hawkes. – Berlin – New York: Walter de Gruyter, 1992. – 891 p.

11. *Thompson*, *J.G.* Nonsolvable finite groups all of whose local subgroups are solvable / J.G. Thompson // Bull. Amer. Math. Soc. – 1968. – Vol. 74, № 3. – P. 383–437.

12. *Suzuki*, *M.* On a class double transitive groups / M. Suzuki // Ann. Math. – 1962. – Vol. 75, № 1. – P. 105–145.

13. *Gorenstein*, *D.* Finite groups / D. Gorenstein. – New York: American Mathematical Society, 1980. – 519 p.

14. *Huppert*, *B.* Endliche Gruppen I / B. Huppert. – Berlin: Springer-Verlag, 1967. – 796 p.

15. *Atlas of finite groups* / J.H. Conway, R.T. Curtis, S.P. Norton, R.A. Parker, R.A. Wilson. – Oxford: Clarendon Press, 1985. – 252 p.

16. *Шеметков*, *Л.А.* Формации конечных групп / Л.А. Шеметков. – Москва: Наука, 1978. – 272 с.

Исследования второго и третьего авторов выполнены при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта Ф23РНФ-237.

Поступила в редакцию 03.02.2024.

Информация об авторах

Бычков Павел Владимирович – к.ф.-м.н., доцент
Каморников Сергей Федорович – д.ф.-м.н., профессор
Тютянов Валентин Николаевич – д.ф.-м.н., профессор

Проблемы физики, математики и техники, № 1 (58), 2024 **ISSN 2077-8708**

МАТЕМАТИКА

УДК 517.538.52+517.538.53 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_68
EDN: MQPGHY

РАЦИОНАЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ РЯДОВ ЛОРАНА

А.П. Старовойтов, Н.В. Рябченко

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

RATIONAL APPROXIMATIONS OF LAURENT SERIES

A.P. Starovoitov, N.V. Ryabchenko

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Изучается новая схема аппроксимации рядов Лорана рациональными функциями. Вводится понятие обобщенного многочлена и, опираясь на него, ставится и решается соответствующая задача Паде для ряда Лорана. Конструктивное решение этой задачи позволяет определить рациональные функции, которые рассматриваются в качестве аппроксимаций Паде ряда Лорана. Установлено, что в простейшем случае определенные аппроксимации Паде ряда Лорана ведут себя также, как и классические аппроксимации Паде степенного ряда: они локализуют особые точки функции, являющейся суммой ряда Лорана.

Ключевые слова: *многочлены Паде*, *степенные ряды*, *ряды Лорана*, *проблема Паде – Лорана*, *теорема Фабри*.

Для цитирования: *Старовойтов*, *А.П.* Рациональные аппроксимации рядов Лорана / А.П. Старовойтов, Н.В. Рябченко // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 68–73. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_68. – EDN: MQPGHY

Abstract. A new scheme for approximating Laurent series with rational functions is investigated. The concept of a generalized polynomial is introduced, and building upon this, a corresponding Padé problem for the Laurent series is formulated and solved. A constructive solution to this problem enables the determination of rational functions, which are then considered as Padé approximations of the Laurent series. It has been established that in the simplest case, these specific Padé approximations of the Laurent series behave similarly to the classical Padé approximations of power series: they localize the singular points of the function that is the sum of the Laurent series.

Keywords: *Padé polynomials*, *power series*, *Laurent series*, *Padé – Laurent problem*, *Fabry*'*s theorem*.

For citation: *Starovoitov*, *A.P.* Rational approximations of Laurent series / A.P. Starovoitov, N.V. Ryabchenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 68–73. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_68 (in Russian). – EDN: MQPGHY

Введение

Классические аппроксимации Паде определяются для рядов вида

$$f^+(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k^+ z^k, \quad f^-(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_k^-}{z^k}. \qquad (0.1)$$

При этом говорят об аппроксимациях Паде соответственно в точках $z=0$ и $z=\infty$.

Аппроксимацией Паде типа (n,m) *ряда* f^+ называют [1] рациональную дробь

$$[n/m]_{f^+} = P_{n,m}^+ / Q_{n,m}^+,$$

где тождественно не равный нулю многочлен $Q_{n,m}^+$, $\deg Q_{n,m}^+ \leqslant m$ и многочлен $P_{n,m}^+$, $\deg P_{n,m}^+ \leqslant n$ определяются из соотношений

$$\left(Q_{n,m}^+ f^+ - P_{n,m}^+\right)(z) = O(z^{n+m+1}). \qquad (0.2)$$

Здесь и далее n, m – целые неотрицательные числа, а под $O(z^p)$ понимаем степенной ряд вида $c_1 z^p + c_2 z^{p+1} + \ldots$ Многочлены Паде $Q_{n,m}^+$, $P_{n,m}^+$ условиями (0.2) определяются не единственным образом, тем не менее, дробь $P_{n,m}^+ / Q_{n,m}^+$ определяет одну и ту же рациональную функцию [2]. В соответствии с (0.2) нахождение многочлена $Q_{n,m}^+(z) = b_0 + b_1 z + \ldots + b_m z^m$ сводится к решению системы m линейных однородных уравнений с $m+1$ неизвестными, которая в матричной форме имеет вид:

$$G_{n,m}(f^+) \cdot u^T = \theta^T,$$

где $u = (b_m \ldots b_1 b_0)$ матрица-строка неизвестных коэффициентов, θ матрица-строка порядка $1 \times (m+1)$, состоящая из нулей, а

$$G_{n,m}(f^+) := \begin{pmatrix} f_{n-m+1}^+ & f_{n-m+2}^+ & \cdots & f_{n+1}^+ \\ f_{n-m+2}^+ & f_{n-m+3}^+ & \cdots & f_{n+2}^+ \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_n^+ & f_{n+1}^+ & \ldots & f_{n+m}^+ \end{pmatrix}$$

матрица системы. Если $G_{n,m}(f^+)$ является матрицей полного ранга, т. е. $rank G_{n,m}(f^+) = m$, то многочлены $Q_{n,m}^+$, $P_{n,m}^+$ определяются однозначно (с точностью до числового множителя) и при подходящем выборе этого множителя имеет место формула

$$Q^+_{n,m}(z)=\begin{vmatrix} f^+_{n-m+1} & f^+_{n-m+2} & \dots & f^+_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f^+_n & f^+_{n+1} & \dots & f^+_{n+m} \\ z^m & z^{m-1} & \dots & 1 \end{vmatrix} \qquad (0.3)$$

(здесь и далее $f^+_k=0$ при $k<0$); аналогичная формула имеет место и для $P^+_{n,m}$ [3].

Из (0.3) при $f^+_{n+1}\neq 0$ следует, что единственный полюс z_n дроби $[n/1]_{f^+}$ вычисляется по формуле $z_n=f^+_n/f^+_{n+1}$. Согласно теореме Фабри «об отношении» [4], если для коэффициентов ряда f^+ выполняется соотношение

$$\lim_{n\to\infty}\frac{f^+_n}{f^+_{n+1}}=z^*, \qquad (0.4)$$

то радиус сходимости R ряда f^+ равен $|z^*|$ и z^* – особая точка суммы ряда f^+. Таким образом, если выполняются условия теоремы Фабри, то полюсы z_n дроби $[n/1]_{f^+}$ сходятся к особой точке суммы степенного ряда f^+ и, наоборот, если существует предел $\lim\limits_{n\to\infty}z_n=z^*$, то z^* – особая точка суммы степенного ряда f^+.

Определим теперь аппроксимации Паде в точке $z=\infty$. В этом случае обычно ограничиваются диагональным случаем, когда $n=m$ (см., например, [2]). Если тождественно не равный нулю многочлен Q^-_n, $\deg Q^-_n\leqslant m$ и многочлен P^-_n, $\deg P^-_n\leqslant n$ удовлетворяют условиям

$$\left(Q^-_n f^- - P^-_n\right)(z)=O\left(\frac{1}{z^{n+1}}\right), \qquad (0.5)$$

то рациональную дробь $[n/n]_{f^-}=P^-_n/Q^-_n$ называют *n-ой аппроксимацией Паде ряда* f^-. Здесь и далее под $O\left(z^{-p}\right)$ понимаем ряд вида $c_1z^{-p}+c_2z^{-p-1}+\dots$ Аппроксимации Паде $[n/n]_{f^-}$ всегда существуют и определяются соотношением (0.5) единственным образом [2].

Определение аппроксимаций Паде $[n/m]_{f^-}$ для произвольной пары индексов (n,m) имеет некоторую специфику (см., например, [5], [6]). Рассмотрим степенной ряд $g^+(z):=f^-(1/z)$. Тогда по определению [6]

$$[n/m]_{f^-}(z):=[n/m]_{g^+}\left(z^{-1}\right). \qquad (0.6)$$

Если обозначить через $Q^+_{n,m}(\cdot;g^+),P^+_{n,m}(\cdot;g^+)$ – многочлены Паде ряда g^+, то из (0.2) получим

$$Q^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right)f^-(z)-P^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right)=O\left(\frac{1}{z^{n+m+1}}\right).$$

Умножим правую и левую части предыдущего равенства на z^m. Тогда

$$z^mQ^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right)f^-(z)-z^mP^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right)=O\left(\frac{1}{z^{n+1}}\right).$$

Из (0.6) следует, что $[n/m]_{f^-}=P^-_{n,m}/Q^-_{n,m}$, где

$$Q^-_{n,m}(z):=z^mQ^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right),$$
$$P^-_{n,m}(z):=z^mP^+_{n,m}\left(z^{-1};g^+\right).$$

Если матрица $G_{n,m}(g^+)$ является матрицей полного ранга, то, учитывая (0.3), получим

$$Q^-_{n,m}(z)=\begin{vmatrix} f^-_{n-m+1} & f^-_{n-m+2} & \dots & f^-_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f^-_n & f^-_{n+1} & \dots & f^-_{n+m} \\ 1 & z & \dots & z^m \end{vmatrix}$$

(здесь $f^-_k=0$ при $k<1$). В случае $n=m$ данное определение равносильно определению диагональных аппроксимаций Паде, приведенному выше. Например, из предыдущей формулы следует хорошо известное представление (см., например, [2]) для знаменателя диагональных аппроксимаций Паде

$$Q^-_{n,n}(z)=\begin{vmatrix} f^-_1 & f^-_2 & \dots & f^-_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f^-_n & f^-_{n+1} & \dots & f^-_{2n} \\ 1 & z & \dots & z^n \end{vmatrix}.$$

Отметим, что при $n=m$ числитель дроби $[n/n]_{f^-}$ $P^-_{n,n}$ является многочленом. Для произвольной пары индексов (n,m) это не так. Например, если $n>m+1$, то $P^-_{n,m}$, вообще говоря, многочленом не является, поскольку

$$P^-_{n,m}(z)=z^m\left(\frac{a_1}{z}+\dots+\frac{a_n}{z^n}\right)=$$
$$=a_0z^{m-1}+\dots+a_m+\frac{a_{m+1}}{z}+\dots+\frac{a_n}{z^{n-m}}.$$

Всё это говорит о том, что определения недиагональных аппроксимаций Паде в точке $z=\infty$ и в точке $z=0$ отличаются содержанием.

Рассмотрим теперь произвольный ряд Лорана

$$f(z)=\sum_{k=-\infty}^{\infty}f_kz^k:=\sum_{k=0}^{\infty}f^+_kz^k+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{f_{-k}}{z^k}:= \qquad (0.7)$$
$$:=f^+(z)+f^-(z),$$

где f^+ – правильная, а f^- – главная его части. В настоящее время существует много различных подходов в построении аналога классических аппроксимаций Паде для ряда (0.7) (см., например, [1], [5]–[10]). Проще всего воспользоваться готовыми конструкциями для каждого из рядов

f^+, f^- и в качестве определения аппроксимации Паде ряда (0.7) взять их сумму (см., например, [7])

$$[n/m]_f := [n/m]_{f^+} + [n/m]_{f^-}.$$

Не останавливаясь подробно на достоинствах и недостатках этого и других определений, отметим, что до сих пор так называемая «проблема Паде – Лорана» является актуальной. В известной монографии Дж. Бейкера и П. Грейвс-Морриса [1] 1981 года отмечается, что «работа по созданию схемы аппроксимации рядов Лорана с простыми формальными свойствами и общими теоремами сходимости находится в начальной стадии...». Отметим, что с момента выхода этой монографии в данном направлении исследований существенных продвижений мы не видим.

В данной статье предлагается новый подход к указанной проблеме. Он опирается на классическую конструкцию построения аппроксимации Паде, предложенную Г. Фробениусом [11], и, вместе с тем, имеет отличие в постановке самой задачи: вместо обычных многочленов мы рассматриваем *обобщенные многочлены* (*многочлены Лорана*). Предложенный нами поход вполне оправдан, поскольку определённые нами далее обобщенные многочлены, как уже было отмечено, неявно присутствуют в классическом определении аппроксимаций Паде в точке $z=\infty$.

1 Аппроксимации Паде ряда Лорана

Обозначим через L_m множество всех рациональных дробей вида

$$Q(z) = \frac{a_{-p}}{z^p} + \ldots + \frac{a_{-1}}{z} + a_0 + a_1 z + \ldots + a_p z^p,$$

где $a_{\pm k}$ – комплексные числа, $p \leqslant m$. Функцию $Q \in L_m$, будем называть *обобщенным многочленом* (*многочленом Лорана*) *степени не выше m*, а $\deg Q = p \Leftrightarrow |a_{-p}| + |a_p| \neq 0$. По определению n-ой частной суммой ряда (0.7) будем называть обобщенный многочлен

$$S_n(z) = \sum_{k=-n}^{n} f_k z^k.$$

Хорошо известно, что если ряд (0.7) является рядом Лорана функции f аналитической в кольце $K = \{z : 0 < r < |z| < R\}$, то последовательность $\{S_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$ равномерно сходится на любом компакте из K.

Рассмотрим следующую задачу Фробениуса – Паде – Лорана:

Задача $\mathbf{A^L}$. *Для фиксированной пары индексов* (n,m) *и ряда Лорана f найти такие тождественно не равный нулю обобщенный многочлен* $Q_{n,m} \in L_m$ *и обобщенный многочлен* $P_{n,m} \in L_n$, *чтобы*

$$R_{n,m}(z; f) := \left(Q_{n,m} f - P_{n,m}\right)(z) = \\ = \sum_{k=n+m+1}^{\infty} \left(c_k z^k + \frac{c_{-k}}{z^k}\right), \quad (1.1)$$

где $c_{\pm k}$ *– комплексные числа.*

При $m=0$ решением задачи $\mathbf{A^L}$ является n-ая частная сумма S_n ряда Лорана f. Если пара $(Q_{n,m}, P_{n,m})$ является решением задачи $\mathbf{A^L}$, то для любого комплексного числа $\lambda \neq 0$ новая пара $(\lambda Q_{n,m}, \lambda P_{n,m})$ также является решением этой задачи. Следующий пример показывает, что неединственность может быть и более существенной.

***Пример* 1.1.** Пусть $n=2, m=1$, а

$$f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left(z^k + z^{-k}\right),$$

где

$$a_k = \begin{cases} 2, & \text{если } k = 1, 2, 4; \\ 4, & \text{если } k = 3; \\ \dfrac{1}{i!}, & \text{если } k > 4. \end{cases}$$

Тогда любое решение задачи $\mathbf{A^L}$ представимо в виде: $(\lambda Q_{2,1}, \lambda P_{2,1})$, $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \neq 0$, где

$$Q_{2,1}(z) = \frac{a}{z} - \frac{a+b}{2} + bz,$$

$$P_{2,1}(z) = \frac{a+3b}{2}\frac{1}{z^2} + \frac{b-a}{2}\frac{1}{z} + \\ + a + b + \frac{a-b}{2} z + \frac{3a+b}{2} z^2,$$

а a и b произвольные действительные числа не равные нулю одновременно.

***Определение* 1.1.** Будем говорить, что задача $\mathbf{A^L}$ имеет единственное решение, если это решение единственно с точностью до числового множителя, т. е. для любых двух решений $(\bar{Q}_{n,m}, \bar{P}_{n,m})$ и $(\bar{\bar{Q}}_{n,m}, \bar{\bar{P}}_{n,m})$ задачи $\mathbf{A^L}$ найдется такое комплексное число λ, что

$$(\bar{Q}_{n,m}, \bar{P}_{n,m}) = (\lambda \bar{\bar{Q}}_{n,m}, \lambda \bar{\bar{P}}_{n,m}).$$

***Определение* 1.2.** Если пара $(Q_{n,m}, P_{n,m})$ является решением задачи $\mathbf{A^L}$, то рациональную дробь $[n/m]_f = P_{n,m}/Q_{n,m}$ будем называть аппроксимацией Паде типа (n,m) для ряда Лорана f.

Очевидно, что аппроксимации Паде $[n/0]_f = S_n$ всегда существуют и определяются однозначно для любого n. В том случае, когда задача A^L имеет единственное решение, дробь $[n/m]_f$ условиями (1.1) определяется однозначно. Вместе с тем, в отличии от аппроксимаций Паде рядов f^+, f^- аппроксимации Паде ряда Лорана $[n/m]_f$ определяются, вообще говоря, не однозначно. Чтобы доказать это, обозначим через $[2/1]_f^1$ аппроксимацию Паде – Лорана из примера 1, которая соотвествует параметрам $a = b = 1$, через $[2/1]_f^2$ – аппроксимацию, соответствующую параметрам $a = 2$, $b = 0$. Тогда легко показать, что

$$[2/1]_f^1(i) = 2 \neq \frac{-2-6i}{5} = [2/1]_f^2(i).$$

Нашей ближайшей целью является нахождение необходимых и достаточных условий, при выполнении которых задача $\mathbf{A}^{\mathrm{L}}$ имеет единственное решение.

2 Критерий единственности

Без ограничения общности будем рассматривать ряды Лорана (0.7), в которых правильная и главные части имеют бесконечное число членов. Изучение аппроксимаций Паде рядов Лорана, в которых главная или правильная части обрывается на некотором члене, существенно не отличается от изучения классических аппроксимаций Паде рядов f^+ и f^- (см., например, [2]).

Каждому $l \in \mathbb{Z}$ поставим в соответствие матрицу-строку

$$F_l = \left(f_{l+m} f_{l+m-1} \cdots f_{l+1} f_l f_{l-1} \cdots f_{l-m+1} f_{l-m} \right)$$

и при $m \neq 0$ рассмотрим определитель порядка $2m+1$

$$D(n,m;z) =$$

$$= \begin{vmatrix} f_{n+2m} & \cdots & f_{n+m+1} & f_{n+m} & f_{n+m-1} & \cdots & f_n \\ f_{n+2m-1} & \cdots & f_{n+m} & f_{n+m-1} & f_{n+m-2} & \cdots & f_{n-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n+m+1} & \cdots & f_{n+2} & f_{n+1} & f_n & \cdots & f_{n-m+1} \\ z^{-m} & \cdots & z^{-1} & 1 & z & \cdots & z^m \\ f_{-n+m-1} & \cdots & f_{-n} & f_{-n-1} & f_{-n-2} & \cdots & f_{-n-m-1} \\ f_{-n+m-2} & \cdots & f_{-n-1} & f_{-n-2} & f_{-n-3} & \cdots & f_{-n-m-2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{-n} & \cdots & f_{-n-m-1} & f_{-n-m-2} & f_{-n-m-3} & \cdots & f_{-n-2m} \end{vmatrix}.$$

Обозначим через $H_{n,m}$ матрицу порядка $2m \times (2m+1)$, полученную из элементов определителя $D(n,m;z)$ после удаления в нём $(m+1)$-ой строки. Если в определителе $D(n,m;z)$ $(m+1)$-ю строку заменить на строку F_l, получим новый определитель $d_l(n,m)$. Обозначим через $\Delta(n,m)$ определитель порядка $2m$, полученный в результате вычёркивания в определителе $D(n,m;z)$ $(m+1)$-ой строки и $(m+1)$-го столбца.

***Определение* 2.1.** Пару индексов (n,m), $m \neq 0$ будем называть *слабо нормальной* для f, если $H_{n,m}$ является матрицей полного ранга, т. е. $rank H_{n,m} = 2m$.

***Теорема* 2.1**. *Для того, чтобы для фиксированной пары* (n,m), $m \neq 0$ *задача* $\mathbf{A}^{\mathrm{L}}$ *имела единственное решение необходимо и достаточно, чтобы пара* (n,m) *была вполне нормальной для f, т. е.* $rank H_{n,m} = 2m$.

Если $rank H_{n,m} = 2m$, *то при определенном выборе нормирующего множителя справедливы детерминантные представления*:

$$Q_{n,m}(z) = D(n,m;z), \tag{2.1}$$

$$P_{n,m}(z) = \sum_{p=-n}^{n} d_p(n,m) z^p, \tag{2.2}$$

$$R_{n,m}(z) = \sum_{p=n+m+1}^{\infty} \left\{ d_p(n,m) z^p + d_{-p}(n,m) z^{-p} \right\}. \tag{2.3}$$

Доказательство. Пусть искомый многочлен $Q_{n,m}(z)$ имеет вид

$$Q_{n,m}(z) = \sum_{p=-m}^{m} u_p z^p.$$

После преобразований получаем

$$Q_{n,m}(z) f(z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{p=-m}^{m} f_{l-p} u_p \right) z^l = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l z^l,$$

где

$$c_l = \sum_{p=-m}^{m} f_{l-p} u_p, l \in \mathbb{Z}. \tag{2.4}$$

Выберем коэффициенты u_p многочлена $Q_{n,m}$ так, чтобы

$$c_l = 0, l = \pm(n+1), \ldots, \pm(n+m),$$

и положим

$$P_{n,m}(z) = \sum_{p=-n}^{n} c_p z^p.$$

Выбранные таким образом многочлены $Q_{n,m}$, $P_{n,m}$ удовлетворяют условиям (1.1). Остаётся исследовать совместность системы уравнений

$$\sum_{p=-m}^{m} f_{l-p} u_p = 0, l = \pm(n+1), \ldots, \pm(n+m). \tag{2.5}$$

Запишем систему (2.5) в матричной форме

$$H_{n,m} \cdot u^T = \theta^T,$$

где $u = (u_{-m} \ldots u_{-1} u_0 u_1 \ldots u_m)$ матрица-строка неизвестных коэффициентов, а θ матрица-строка, состоящая из $2m+1$ нулей. Система (2.5) является однородной и в ней число неизвестных на единицу больше числа уравнений. Согласно теореме Кронекера – Капелли эта система имеет ненулевое решение. Кроме того, множество всех линейно независимых решений системы (2.5) состоит из одного фундаментального решения тогда и только тогда, когда $rank H_{n,m} = 2m$. В этом случае все остальные ненулевые решения получаются умножением этого фундаментального решения на число $\lambda \neq 0$. Тем самым первая часть теоремы доказана.

Остановимся теперь на доказательстве равенств (2.1)–(2.3). По предположению ранг матрицы $rankH_{n,m}=2m$. Поэтому при некотором *s*, $1\leqslant s\leqslant 2m+1$ определитель, полученный из элементов матрицы $H_{n,m}$ в результате вычеркивания в ней *s*-го столбца, отличен от нуля. Пусть, например, $s=m+1$. Тогда, зафиксировав неизвестное u_0, получим квадратную неоднородную систему

$$\sum_{p=-m}^{-1} f_{l-p}u_p+\sum_{p=1}^{m} f_{l-p}u_p=-f_l u_0,\quad l=\pm(n+1),\ldots,\pm(n+m) \qquad (2.6)$$

главный определитель которой $\Delta(n,m)\neq 0$. Заметим, что $u_0\neq 0$. В противном случае система (2.6), а значит и система (2.5) имели бы только нулевые решения.

Система (2.6) имеет единственное ненулевое решение и найти его можно с помощью формул Крамера:

$$u_p=\frac{\Delta_p(n,\vec{m})}{\Delta(n,\vec{m})},\ \ p=\overline{-m,m},\ \ p\neq 0,$$

где $\Delta_p(n,m)$ определитель, полученный из определителя $\Delta(n,m)$ заменой в нём *p*-го столбца на столбец свободных членов. Если положить $\Delta_0(n,m):=u_0\Delta(n,m)$, то

$$Q_{n,m}(z)=\sum_{p=-m}^{m} u_p z^p=\sum_{p=-m}^{m}\frac{\Delta_p(n,m)}{\Delta(n,m)}z^p. \qquad (2.7)$$

Разлагая определитель $D(n,m;z)$ по элементам $(m+1)$-ой строки и сравнивая с (2.7), делаем вывод, что

$$Q_{n,m}(z)=u_0\frac{D(n,m;z)}{\Delta(n,m)}. \qquad (2.8)$$

Сопоставив (2.7) и (2.4), замечаем, что для нахождения c_p следует только в (2.7) *z* заменить на f_{l-p}. Учитывая введённые обозначения, получаем, что

$$c_p=u_0\frac{d_p(n,m;z)}{\Delta(n,m)}.$$

Поэтому многочлен $P_{n,m}(z)$ и остаточный член $R_{n,m}(z)$ можно представить в виде

$$P_{n,m}(z)=\frac{u_0}{\Delta(n,m)}\sum_{p=-n}^{n} d_p(n,m)z^p, \qquad (2.9)$$

$$R_{n,m}(z)=\frac{u_0}{\Delta(n,m)}\sum_{p=n+m+1}^{\infty}\left(d_p(n,m)z^p+d_{-p}(n,m)z^{-p}\right). \qquad (2.10)$$

Умножая (2.8)–(2.10) на нормирующий множитель $\Delta(n,m)/u_0$, получим равенства (2.1)–(2.3).

Если при вычеркивании в матрице $H_{n,m}$ столбца с номером $s\neq m+1$ получается определитель отличный от нуля, то, рассуждая аналогично, приходим к представлениям (2.1)–(2.3). Теперь остаётся заметить, что поскольку $rankH_{n,m}=2m$, то определитель $D(n,m;z)$ не может быть тождественно равным нулю. □

3 Замечания и следствия

***Замечание* 3.1.** В теореме 2.1 предполагается, что $m\neq 0$. Если $m=0$, то решение задачи $\mathbf{A}^{\mathbf{L}}$ очевидно: с точностью до числового множителя $Q_{n,0}(z)\equiv 1$, а обобщенный многочлен $P_{n,0}$ является *n*-ой частной суммой S_n ряда (0.7).

***Замечание* 3.2.** При доказательстве теоремы 2.1 никак не учитывалось наше предположение о сходимости ряда (0.7). Поэтому все утверждения теоремы остаются в силе, если ряд (0.7) являются формальным.

Отметим также, что если пара (n,m) не является слабо нормальной для *f*, то обобщённые многочлены $Q_{n,m}$, $P_{n,m}$, заданные формулами (2.1) и (2.2), не являются решениями задачи $\mathbf{A}^{\mathbf{L}}$. В частности, в примере 1.1 индекс (2, 1) не является слабо нормальным, и, если вычислять, например, многочлен $Q_{2,1}$ по формуле (2.1), то получим $Q_{2,1}(z)\equiv 0$.

***Следствие* 3.1.** *Пусть пара индексов* (n,m) *является слабо нормальной для f и коэффициенты ряда* (0.7) *действительные числа. Тогда многочлены* $Q_{n,m}$, $P_{n,m}$ *решения задачи* $\mathbf{A}^{\mathbf{L}}$, *определяемые формулами* (2.1) *и* (2.2), *являются обобщенными многочленами с действительными коэффициентами.*

***Следствие* 3.2.** *Для того, чтобы задача* $\mathbf{A}^{\mathbf{L}}$ *всегда имела единственное решение необходимо и достаточно, чтобы все пары индексов* (n,m) *были вполне нормальными для f.*

***Следствие* 3.3.** *Если пара индексов* (n,m) *является вполне нормальной для f, то аппроксимации Паде* $[n/m]_f$ *ряда Лорана f соотношениями* (2.1) *определяются единственным образом.*

В заключении покажем, что в условиях теоремы Фабри аппроксимации Паде $[n/1]_f$ ряда Лорана при $n\to\infty$ ведут себя также, как и классические аппроксимации Паде $[n/1]_{f^+}$ степенного ряда f^+: они локализуют особенности функции *f* суммы ряда (0.7).

Предположим, что *f* аналитична в кольце *K*, $f_{\pm n}\neq 0$ при $n\geqslant n_0$ и существуют пределы

$$\lim_{n\to\infty}\frac{f_n}{f_{n+1}}=z_+\neq 0,\ \lim_{n\to\infty}\frac{f_{-n}}{f_{-n-1}}=\frac{1}{z_-}\neq\infty. \qquad (3.1)$$

Тогда по теореме Фабри точки $z_\pm$ являются особыми точками суммы ряда *f* и лежат на границе кольца K: $|z_-|=r$, а $|z_+|=R$. Выбрав нормирующий множитель для знаменателя дроби $[n/1]_f$, получим

$$Q^*_{n,1}(z)=\frac{1}{f_{n+3}f_{-n-3}}Q_{n,1}(z)=$$
$$=\begin{vmatrix} \dfrac{f_{n+2}}{f_{n+3}} & \dfrac{f_{n+1}}{f_{n+3}} & \dfrac{f_n}{f_{n+3}} \\ z^{-1} & 1 & z \\ \dfrac{f_{-n}}{f_{-n-3}} & \dfrac{f_{-n-1}}{f_{-n-3}} & \dfrac{f_{-n-2}}{f_{-n-3}} \end{vmatrix}. \qquad (3.2)$$

Отсюда и из (3.1) следует, что

$$\lim_{n\to\infty}Q^*_{n,1}(z)=\frac{1}{z}\begin{vmatrix} z_+ & z_+^2 & z_+^3 \\ 1 & z & z^2 \\ \dfrac{1}{z_-^3} & \dfrac{1}{z_-^2} & \dfrac{1}{z_-} \end{vmatrix}=$$

$$=\frac{z_+}{zz_-^3}\begin{vmatrix} 1 & z_+ & z_+^2 \\ 1 & z & z^2 \\ 1 & z_- & z_-^2 \end{vmatrix}=\frac{z_+}{z_-^2}(z_n z_+)(z-z_+)\left(\frac{1}{z}-\frac{1}{z_-}\right).$$

Опираясь на предыдущие равенства, легко показать, что при сделанных предположениях для всех достаточно больших n пара индексов $(n, 1)$ является вполне нормальной. Поэтому формула (3.2) справедлива, по крайней мере, при всех достаточно больших n.

Таким образом, полюса дроби $[n/1]_f$ стремятся к особым точкам $z_\pm$ функции f, лежащим на границе кольца K, внутри которого f аналитична. В связи с этим напомним, что А.А. Гончар высказал гипотезу о том, что свойство аппроксимаций Паде $[n/1]_{f^+}$, отмеченное выше, имеет место для аппроксимаций Паде $[n/m]_{f^+}$ при любом фиксированном m. Первоначально справедливость этой гипотезы была установлена в ослабленном варианте [12]. В общем случае гипотеза А.А. Гончара доказана С.П. Суетиным [13], [14]. Вполне естественно предположить, что в адаптированном виде гипотеза А.А. Гончара справедлива и для аппроксимаций Паде $[n/m]_f$ ряда Лорана (0.7).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бейкер мл.*, *Дж.* Аппроксимации Паде. 1. Основы теории. 2. Обобщения и приложения / Дж. Бейкер мл., П. Грейвс-Моррис. – Москва: Мир, 1986.

2. *Никишин*, *Е.М.* Рациональные аппроксимации и ортогональность / Е.М. Никишин, В.Н. Сорокин. – Москва: Наука, 1988.

3. *Старовойтов*, *А.П.* О детерминантных представлениях многочленов Эрмита – Паде / А.П. Старовойтов, Н.В. Рябченко // Труды Московского математического общества. – 2022. – Т. 83, № 1. – С. 17–35.

4. *Бибербах*, *Л.* Аналитическое продолжение / Л. Бибербах. – Москва: Наука, 1967.

5. *Gragg*, *W.B.* Laurent, Fourier and Chebyshev – Padé tables. In: “Padé and Rational Approximation” / W.B. Gragg; Eds. E.B. Saff, R.S. Varga. – Academic Press, 1977. – P. 61–72.

6. *Chisholm*, *J.S.R.* Generalisations of Padé Approximation for Chebyshev and Fourier Series / J.S.R. Chisholm, A.K. Common // In Proc. 1979 Int. Christoffel Symposium. Ed. P.L. Butzer. – Basel: Birkhlluser Verlag, Springer Basel AG, 1981. – P. 212–231.

7. *Gragg*, *W.B.* The Laurent-Padé tables, Fourier and Chebyshev – Padé tables / W.B. Gragg, G.D. Johnson // Proc. I.F.I.P. Congress 74, North Holland 1974. – P. 632–637.

8. *Cheney*, *E.W.* Introduction to Approximation Theory / E.W. Cheney. – McGraw-Hill Book Company, 1966.

9. *Fleischer*, *J.* Analytic continuation of scattering amplitudes and Padé approximants / J. Fleischer // Nuclear Physics B. – 1972. – Vol. 37, № 1. – P. 59–76.

10. *Fleischer*, *J.* Nonlinear pade approximants for legendre series / J. Fleischer // J. Math. Phys. – 1973. – Vol. 14. – P. 246–248.

11. *Frobenious*, *G.* Ueber Relationen zwischen den Naherung-sbruchen von Potenzreihen / G. Frobenious // Journal für die reine und angewandte Mathematik. – 1881. – Vol. 90. – P. 1–17.

12. *Вавилов*, *В.В.* Об одной обратной задаче для строк таблицы Паде / В.В. Вавилов, Г.Л. Лопес, В.А. Прохоров // Математический сборник. – 1979. – Т. 152, № 1. – С. 117–127.

13. *Суетин*, *С.П.* О полюсах *m*-й строки таблицы Паде / С.П. Суетин // Математический сборник. – 1983. – Т. 120 (162), № 4. – С. 500–504.

14. *Суетин*, *С.П.* Об одной обратной задаче для *m*-й строки таблицы Паде / С.П. Суетин // Математический сборник. – 1984. – Т. 124 (166), № 2. – С. 238–250.

Поступила в редакцию 09.01.2024.

Информация об авторах

Старовойтов Александр Павлович – д.ф.-м.н., профессор
Рябченко Наталия Валерьевна – к.ф.-м.н.

Проблемы физики, математики и техники, № 1 (58), 2024 **ISSN 2077-8708**

ТЕХНИКА

УДК 621.31 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_74
EDN: LTQHPX

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ОГРАНИЧИТЕЛЕЙ ПЕРЕНАПРЯЖЕНИЯ МЕТОДОМ ТЕОРЕМ СЛОЖЕНИЯ

Д.В. Комнатный

Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого

ELECTROSTATIC FIELD OF OVERVOLTAGE LIMITER CALCULATION BY ADDITION THEOREMS METHOD

D.V. Komnatny

Sukhoi State Technical University of Gomel

Аннотация. Рассматривается расчет электростатического поля тороидальных экранов ограничителя перенапряжения высоковольтной линии электропередачи. Расчет осуществляется методом теорем сложения. Получены алгебраические уравнения для вычисления коэффициентов разложения потенциала экранов по тороидальным функциям. Описан способ учета влияния заряда грозовой тучи на электростатическое поле вблизи ограничителя. Проанализирована область применения полученных результатов.

Ключевые слова: *ограничитель перенапряжения*, *тороидальный экран*, *электростатическое поле*, *теоремы сложения*, *электростатический потенциал*, *гармонические тороидальные функции*, *грозовая туча*.

Для цитирования: *Комнатный*, *Д.В.* Расчет электростатического поля ограничителей перенапряжения методом теорем сложения / Д.В. Комнатный // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 74–78. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_74. – EDN: LTQHPX

Abstract. The electrostatic field calculation in toroidal screens of high-voltage power line overvoltage limiter is considered. The calculation is implemented by addition theorems method. The algebraic equations for calculations of coefficients of screen potential expansion in terms of toroidal functions are obtained. The way of storm-cloud charge influence on electrostatic field near the limiter accounting is described. The field of obtained results application is analyzed too.

Keywords: *overvoltage limiter*, *toroidal screen*, *electrostatic field*, *addition theorems*, *electrostatic potential*, *harmonic toroidal functions*, *storm-cloud.*

For citation: *Komnatny*, *D.V.* Electrostatic field of overvoltage limiter calculation by addition theorems method / D.V. Komnatny // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 74–78. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_74 (in Russian). – EDN: LTQHPX

Введение

В конструкциях современных линий электропередачи находят широкое применение ограничители перенапряжения, снабженные экранами в виде трех тороидальных деталей из проводника для выравнивания электростатического поля. Такое выравнивание позволяет повысить срок эксплуатации ограничителя [1]–[3].

Для проектирования тороидальных экранов и анализа конфигурации электростатического поля в экранирующих конструкциях предложен метод граничных элементов с кольцевидными граничными элементами [3], [4]. Поскольку этот метод является численным, то анализ электростатического поля конструкции затруднен значительным объемом вычислений. В [5] для тех же целей предложен метод конечных разностей. Но в данном случае требуется применять сетки большой размерности и вводить искусственное ограничение области решения задачи. С учетом особенностей численных методов в [6] предлагается расчет конструкции экранов ограничителя с помощью максвелловых потенциальных коэффициентов. Но в этом случае тороидальный экран приближенно заменяется кольцевым зарядом.

Современный уровень развития метода разделения переменных дает возможность расчета электростатических полей в областях со сложной конфигурацией границ [7]. В частности, получены решения задачи электростатики для двух проводящих торов [8], для проводящего тора в поперечном, продольном электрических полях и в поле точечного заряда [9], [10], для системы из концентрических проводящего тора и сферического сегмента [11], для системы из соосных тора и плоского круглого диска [12], для тора со специальной моделью материала [13]. Накопленный материал позволяет поставить задачу электростатики для системы трех тороидальных экранов с учетом возможного воздействия на эту систему электростатического поля грозовой тучи и решить ее аналитическим методом.

Таким образом, в статье поставлена цель получения решения задачи электростатики для системы трех проводящих тороидальных экранов аналитическим методом, который позволяет точно учесть конфигурацию граничных поверхностей задачи, а результат решения может применяться для анализа конструкций реального электротехнического устройства.

1 Постановка задачи

Так как ограничители напряжения подвешены на мачтах линий электропередач достаточно далеко от земли, то модельная задача для электростатического поля ограничителя ставится без учета влияния поверхности земли [6].

По материалам [6] задача электростатики для конструкции экранов ограничителя может быть поставлена следующим образом.

В пространстве R^3 с диэлектрической проницаемостью среды ε_0 (воздух) размещены три круговых тора с малыми радиусами торов r_j и большими радиусами R_j ($j = 1,\ 2,\ 3$). Центры торов O_j лежат на одной прямой, перпендикулярной плоскости земли. Торы изготовлены из проводящего материала. В общем случае потенциал поверхности S_j каждого тора $V_j \neq 0$.

Наиболее значимым источником внешнего электростатического поля, влияющего на работу ограничителя, является поле заряженных областей грозовых туч. Для учета этого влияния предполагается, что на оси системы торов на значительном отдалении от нее находится точечный электрический заряд q, который моделирует область грозовой тучи [14]. Такая модель тучи допустима, так как грозовые облака находятся на большой высоте порядка единиц километров.

Область пространства вне торов обозначается D. В этой области электростатическое поле описывается потенциальными функциями u_j для полей торов и потенциальной функцией u_0 для точечного заряда. Суммарный потенциал электростатического поля в D

$$u = \sum_{j=1}^{3} u_j + u_0.$$

Для электростатического поля в области D ставится краевая задача.

Потенциал электростатического поля в области D удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\Delta u = 0 \ \text{ в } D. \qquad (1.1)$$

На поверхностях торов выполняется граничное условие

$$u\big|_{S_j} = V_j. \qquad (1.2)$$

Потенциал в области D удовлетворяет условию на бесконечности

$$u(M) \to 0 \ \text{ при } M \to \infty. \qquad (1.3)$$

На основании решения краевой задачи (1.1)–(1.3) требуется определить потенциал электростатического поля в D.

2 Вывод системы уравнений для коэффициентов разложения

Для решения краевой задачи (1.1)–(1.3) с центрами торов O_j связываются декартова прямоугольная система координат x_j, y_j, z_j и тороидальная система координат $\alpha_j, \beta_j, \varphi_j$ (рисунок 2.1).

Декартовы и тороидальные координаты в этих системах связаны соотношениями [8], [15]

$$\alpha_j = \operatorname{arth} \frac{2c_j\sqrt{x_j^2 + y_j^2}}{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2 + c_j^2},$$

$$\beta_j = \operatorname{arctg} \frac{2c_j z_j}{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2 - c_j^2}, \quad \varphi_j = \operatorname{arctg} \frac{y_j}{x_j}.$$

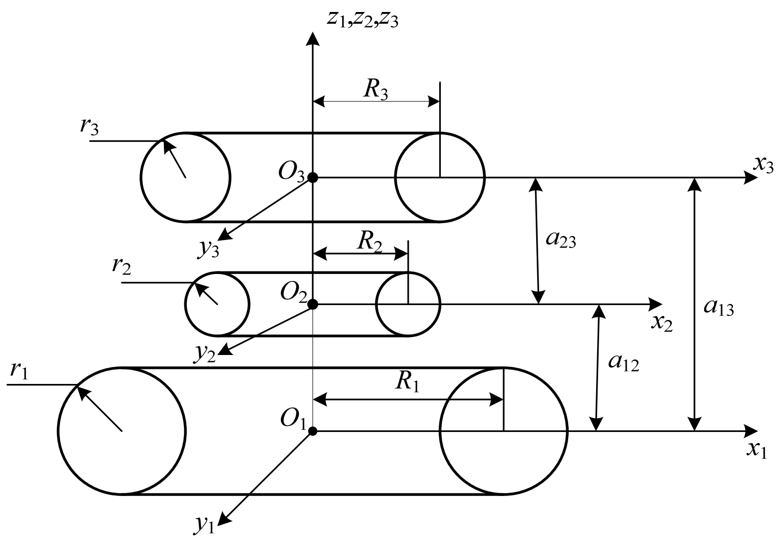


Рисунок 2.1 – Тороидальные экраны с сопутствующими системами координат

В этих системах координат поверхности S_j описываются соотношениями [8]

$$\alpha_j\left(S_j\right)=\xi_j=\ln\left(\frac{R_j}{r_j}-\sqrt{\left(\frac{R_j}{r_j}\right)^2-1}\right),\ c_j=r_j\operatorname{sh}\xi_j.$$

Потенциалы торов представляются через гармонические тороидальные функции с учетом симметрии задачи [8], [16]

$$u_1=R\left(\alpha_1,\beta_1\right)\sum_{n=-\infty}^{\infty}x_n^{(1)}\frac{P_{n-\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\right)}{P_{n-\frac{1}{2}}\left(\xi_1\right)}e^{jn\beta_1},\qquad(2.1)$$

$$u_2=R\left(\alpha_2,\beta_2\right)\sum_{m=-\infty}^{\infty}x_m^{(2)}\frac{P_{m-\frac{1}{2}}\left(\alpha_2\right)}{P_{m-\frac{1}{2}}\left(\xi_2\right)}e^{jm\beta_2},\qquad(2.2)$$

$$u_3=R\left(\alpha_3,\beta_3\right)\sum_{k=-\infty}^{\infty}x_k^{(3)}\frac{P_{k-\frac{1}{2}}\left(\alpha_3\right)}{P_{k-\frac{1}{2}}\left(\xi_3\right)}e^{jk\beta_3},\qquad(2.3)$$

где x – неизвестные коэффициенты разложения; $P_{s-1/2}$ – функции Лежандра;

$$R\left(\alpha_j,\beta_j\right)=\sqrt{2\left(\operatorname{ch}\alpha_j-\cos\beta_j\right)}.$$

Представления (2.1)–(2.3) удовлетворяют уравнению Лапласа (1.1) и условию на бесконечности (1.3).

Чтобы удовлетворить граничному условию (1.2) для поверхности S_1 потенциалы (2.2) и (2.3), аналогично [8], переразлагаются в системе координат $\alpha_1,\beta_1,\varphi_1$ с помощью известной теоремы сложения [16], которая осуществляет преобразование в сдвинутой системе координат вниз

$$u_2=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{x_m^{(2)}}{P_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right)}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\overline{A_{mn}\left(c_2,c_1,a_{12}\right)}\times$$
$$\times R\left(\alpha_1,\beta_1\right)Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\alpha_1\right)e^{jn\beta_1},\qquad(2.4)$$

$$u_3=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{x_k^{(3)}}{P_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right)}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\overline{A_{kn}\left(c_3,c_1,a_{13}\right)}\times$$
$$\times R\left(\alpha_1,\beta_1\right)Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\alpha_1\right)e^{jn\beta_1},\qquad(2.5)$$

где a_{12}, a_{13} – расстояние между центрами соответствующих торов (рисунок 1), м; $Q_{s-1/2}$ – функция Лежандра.

В (2.4) и (2.5), также в следующих формулах

$$A_{ns}\left(c_1,c_2,a\right)=$$
$$=\frac{2c_1\left(a+jc_1+jc_2\right)^{n+s}\left[a^2+\left(c_1-c_2\right)^2\right]^{-1/2}}{\pi\left(a+jc_2-jc_1\right)^n\left(a+jc_1-jc_2\right)^n}\times$$
$$\times{}_2F_1\left(n+\frac{1}{2};s+\frac{1}{2};1\right)-\frac{4c_1c_2}{a^2+\left(c_1-c_2\right)^2},$$

где ${}_2F_1$ – гипергеометрическая функция [16].

После подстановки (2.1), (2.4) и (2.5) в (1.2) и приравнивания коэффициентов при одинаковых значениях экспоненты и при $\alpha_1=\xi_1$ получается уравнение для неизвестных коэффициентов разложений потенциала. Правая часть граничного условия преобразуется по известному разложению [17].

$$x_n^{(1)}+\sum_{m=-\infty}^{\infty}x_m^{(2)}\overline{A_{mn}\left(c_2,c_1,a_{12}\right)}\frac{Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_1\right)}{P_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right)}+$$
$$+\sum_{k=-\infty}^{\infty}x_k^{(3)}\overline{A_{kn}\left(c_3,c_1,a_{13}\right)}\frac{Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_1\right)}{P_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right)}=\qquad(2.6)$$
$$=\frac{V_1}{\pi}Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_1\right),\ n=0,\pm1,\pm2,\pm3\ldots$$

Чтобы удовлетворить граничному условию (1.2) для поверхности S_2 потенциал (2.1) переразлагается в системе координат $\alpha_2,\beta_2,\varphi_2$ с помощью известной теоремы сложения [16], которая осуществляет преобразование в сдвинутой системе координат вверх. Потенциал (2.3) переразлагается с помощью известной теоремы сложения [16], которая осуществляет преобразование в сдвинутой системе координат вниз. В результате преобразований, аналогичных вышерассмотренным, получается алгебраическое уравнение для неизвестных коэффициентов разложения

$$x_m^{(2)}+\sum_{n=-\infty}^{\infty}x_n^{(1)}A_{nm}\left(c_2,c_1,a_{12}\right)\frac{Q_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right)}{P_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_1\right)}+$$
$$+\sum_{k=-\infty}^{\infty}x_k^{(3)}\overline{A_{km}\left(c_3,c_2,a_{23}\right)}\frac{Q_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right)}{P_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right)}=\qquad(2.7)$$
$$=\frac{V_2}{\pi}Q_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right),\ m=0,\pm1,\pm2,\pm3\ldots$$

Чтобы удовлетворить граничному условию (1.2) для поверхности S_3 потенциалы (2.1) и (2.2) переразлагаются в системе координат $\alpha_3,\beta_3,\varphi_3$ с помощью известной теоремы сложения [16], которая осуществляет преобразование в сдвинутой системе координат вверх. В результате получается алгебраическое уравнение для неизвестных коэффициентов разложения

$$x_k^{(3)}+\sum_{n=-\infty}^{\infty}x_n^{(1)}A_{nk}\left(c_1,c_3,a_{13}\right)\frac{Q_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right)}{P_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_1\right)}+$$
$$+\sum_{m=-\infty}^{\infty}x_m^{(2)}A_{mk}\left(c_2,c_3,a_{23}\right)\frac{Q_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right)}{P_{m-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_2\right)}=\qquad(2.7)$$
$$=\frac{V_3}{\pi}Q_{k-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_3\right),\ k=0,\pm1,\pm2,\pm3\ldots$$

Уравнения (2.6), (2.7), и (2.7) в совокупности образуют бесконечную систему алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложений (2.1), (2.2) и (2.3), которая может быть разрешена методом редукции [8]. Вычисление функций Лежандра может быть выполнено по известным соотношениям [11], [17]. Расчетное выражение гипергеометрической функции указано в [16].

3 Учет потенциала поля грозовой тучи

Расположение точечного заряда q, моделирующего область грозовой тучи, показано на рисунке 3.1. Расстояния b_j от центров торов O_j до точечного заряда O_4 много больше расстояний между центрами торов и их радиусов.

Для учета потенциала указанного заряда требуется в правые части уравнений (2.6), (2.7) и (2.7) ввести выражение этого потенциала в соответствующей тороидальной системе координат с противоположным знаком на основании выражения суммарного потенциала в D и граничного условия (1.2).

Если с точкой O_4 связать сферическую систему координат r_4, θ_4, φ_4, то потенциал точечного заряда выражается по формуле [18]

$$u_0 = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_4}P_0^0\left(\cos\theta_4\right), \tag{3.1}$$

где $P()$ – полином Лежандра.

Тогда для переразложения потенциала (3.1) в тороидальных системах координат $\alpha_j, \beta_j, \varphi_j$ применяется метод комбинирования теорем сложения, указанный в [16]. Вначале предполагается, что с точками O_j связана вспомогательная сферическая система координат r_j, θ_j, φ_j. Тогда потенциал (3.1) переразлагается в каждой из этих систем координат с помощью теоремы сложения, связывающей потенциалы в двух сферических системах координат со сдвигом вниз. Теорема сложения выбирается с учетом того, что поле вокруг ограничителя перенапряжения рассматривается в области размером порядка единиц метров, что значительно меньше расстояния от ограничителя до области грозовой тучи. Тогда на основании [16], [18] результат переразложения

$$u_0 = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{b_j^{s+1}}r_j^s P_s\left(\cos\theta_j\right). \tag{3.2}$$

Выражение для потенциала точечного заряда (3.2) переразлагается в тороидальной системе координат $\alpha_j, \beta_j, \varphi_j$ с помощью теоремы сложения 264.3.10 из [16], тогда указанное выражение принимает вид

$$\begin{gathered} u_0 = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{b_j^{s+1}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}T_{sn}^0\left(c_j\right)\times \\ \times R\left(\alpha_j,\beta_j\right)Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\alpha_j\right)e^{jn\beta_j}. \end{gathered} \tag{3.3}$$

Из (3.3) следует, что для учета потенциала области грозовой тучи, в правые части уравнений (2.6)–(2.7) должен быть добавлен член

$$\begin{gathered} u_0\left(\xi_j\right) = \\ = \frac{-q}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{b_j^{s+1}}\sum_{n(m,k)=-\infty}^{\infty}T_{sn}^0\left(c_j\right)Q_{n-\frac{1}{2}}\left(\operatorname{ch}\xi_j\right). \end{gathered} \tag{3.4}$$

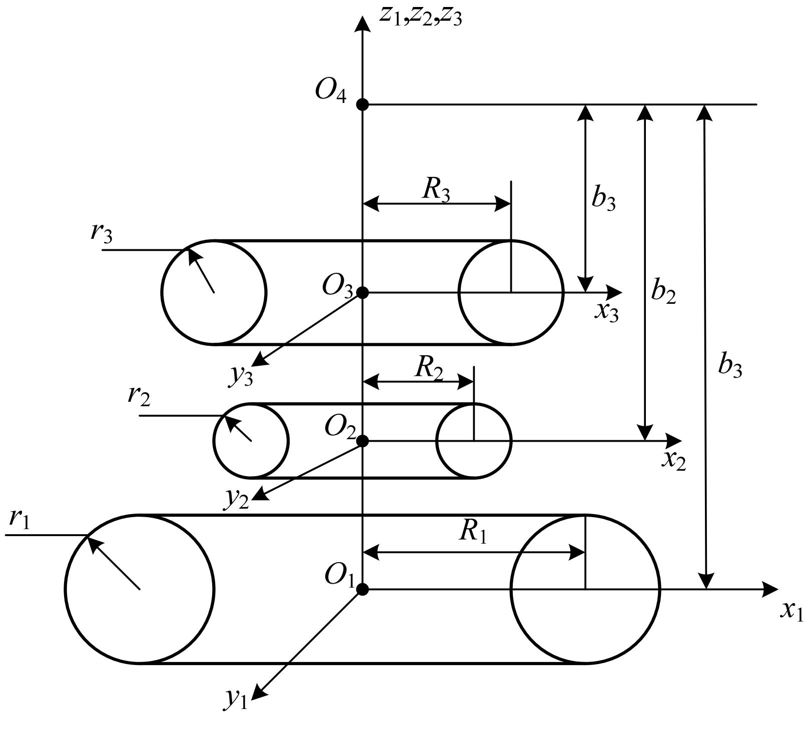


Рисунок 3.1 – Местоположение заряда грозовой тучи относительно ограничителя

В (3.3) и (3.4) на основании [16]

$$T_{sn}^{0}\left(c_j\right)=\frac{j^s c_j^s}{2!\pi}\,{}_2F_1\left(-s,n+\frac{1}{2},1,2\right).$$

Таким образом, получены выражения для описания потенциала поля точечного заряда, моделирующего область грозовой тучи в тороидальных системах координат, связанных с экранами ограничителя напряжения. Эти выражения позволяют составить систему уравнений для коэффициентов разложения потенциала электростатического поля этих экранов в случае присутствия грозовой тучи над мачтой линии и учесть влияние грозовой тучи на функционирование ограничителя.

Заключение

В статье показана принципиальная возможность анализа электростатического поля в элементах конструкции линий электропередач – ограничителей напряжения, методом теорем сложения.

По сравнению с методом потенциальных коэффициентов [6] предлагаемый в статье метод позволяет более точно проанализировать распределение потенциала в конструкции ограничителя перенапряжения, учесть влияние внешних источников электростатического поля, которыми на практике оказываются заряженные области грозовых туч.

По сравнению с численными методами [3]–[5] точность предлагаемого метода не ниже, так как на практике система уравнений предлагаемого метода решается методом редукции численно. Все сравниваемые методы обладают сравнимой трудоемкостью при составлении и решении уравнений со специальными функциями.

Предлагаемый метод может применяться при разработке ограничителей напряжения высоких классов напряжения, где требуется высокая точность анализа условий работы экранов, и при разработке ограничителей для грозоактивных местностей. В общем случае метод теорем сложения является перспективным методом решения задач техники высоких напряжений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Александров*, *Г.И.* Изоляция электрических аппаратов высокого напряжения / Г.И. Александров, В.Л. Иванов. – Москва: Энергоатомиздат, 1994. – 207 с.

2. *Расчет электрических полей устройств высокого напряжения* / И.П. Белоедова [и др.], под ред. Е.С. Колечицкого. – Москва: Издательский дом МЭИ, 2016. – 248 с.

3. *Колечицкий*, *Е.С.* Расчет электрических полей устройств высокого напряжения / Е.С. Колечицкий. – Москва: Энергоатомиздат, 1983. – 168 с.

4. *Гримальский*, *О.В.* Расчет электрических полей изоляционных конструкций / О.В. Гримальский, В.Л. Иванов. – Кишинев: Штиница, 1988. – 106 с.

5. *Сборник задач по теоретическим основам электротехники*: в 2 т. / П.А. Бутырин [и др.]; под ред. П.А. Бутырина. – Москва: Издательский дом МЭИ, 2013. – Т. 2: Электрические цепи с распределенными параметрами. Электромагнитное поле. – 571 с.

6. *Александров*, *Г.Н.* Молния и молниезащита / Г.Н. Александров. – Москва: Наука, 2008. – 274 с.

7. *Шушкевич*, *Г.Ч.* Моделирование электростатических полей системы тонких незамкнутых оболочек / Г.Ч. Шушкевич // Научные исследования преподавателей факультета математики и информатики / Гродненский государственный университет им. Янки Купалы. – Гродно, 2010. С. 117–122.

8. *Ерофеенко*, *В.Т.* Задача электростатики для двух тороидальных проводников / В.Т. Ерофеенко // Журнал технической физики. – 1986. – Т. 56, № 8. – С. 1641–1643.

9. *Scharstein*, *R.W.* Electrostatic excitation of a conducting toroid: exact solution and thin-wire approximation / R.W. Scharstein, H.B. Wilson // Electromagnetics. – 2005. – Vol. 25, № 1. – P. 1–19.

10. *Slivnik*, *T.* Toriod immersed in a homogeneous electric field / T. Slivnik // IEE Proceedings A. – 1983. – Vol. 130, № 5. – P. 261–263.

11. *Шушкевич*, *Г.Ч.* Электростатическое поле тонкой незамкнутой сферической оболочки и тора / Г.Ч. Шушкевич // Журнал технической физики. – 1998. – Т. 68, № 7. – С. 1–6.

12. *Шушкевич*, *Г.Ч.* Моделирование полей в многосвязных областях в задачах электростатики / Г.Ч. Шушкевич. – Saarbrucken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2015. – 228 с.

13. *Ерофеенко*, *В.Т.* Электрическое поле тора со специальной моделью проводящего материала / В.Т. Ерофеенко, Д.В. Комнатный // Вестник ГГТУ им. П.О. Сухого. – 2023. – № 2. – С. 88–99.

14. *Drabkin*, *M.M.* Interaction between lightning channel and CTS / M.M. Drabkin // 1999 IEEE international symposium on Electromagnetic compatibility / IEEE. – N. Y., 1999. – P. 643–645.

15. *Неснов*, *Д.В.* Элементы теории поля в тороидальных координатах / Д.В. Неснов // Строительство и техногенная безопасность. – 2019. – № 16. – С. 17–25.

16. *Ерофеенко*, *В.Т.* Теоремы сложения / В.Т. Ерофеенко. – Минск: Наука и техника, 1989. – 254 с.

17. *Лебедев*, *Н.Н.* Специальные функции и их приложения / Н.Н. Лебедев. – Москва: ГИФМЛ, 1963. – 358 с.

18. *Ерофеенко*, *В.Т.* Основы математического моделирования / В.Т. Ерофеенко, И.С. Козловская. – Минск: БГУ, 2012. – 195 с.

Поступила в редакцию 23.10.2023.

Информация об авторах

Комнатный Дмитрий Викторович – к.т.н., доцент

УДК 621.384.3

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_79
EDN: FUIQSP

ИНТЕГРАЛЬНАЯ СХЕМА СЧИТЫВАНИЯ ДАННЫХ С НЕОХЛАЖДАЕМЫХ ТЕПЛОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ БОЛОМЕТРИЧЕСКОГО ТИПА

Чан Ван Чиеу, Дао Динь Ха, П.Э. Новиков, К.В. Корсак, И.Ю. Ловшенко, В.Р. Стемпицкий

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, *Минск*

READOUT INTEGRATED CIRCUIT OF THERMAL UNCOOLED BOLOMETRIC TYPE DETECTORS

Tran Van Trieu, Dao Dinh Ha, P.E. Novikov, K.V. Korsak, I.Yu. Lovshenko, V.R. Stempitsky

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, *Minsk*

Аннотация. Важной задачей в области проектирования сенсорных устройств, в т. ч. в области термографии, является разработка систем, обеспечивающих точную обработку входных данных, а также их преобразование в цифровой сигнал. Представлены результаты применения реализованной на языке описания аппаратуры Verilog-A обобщенной электрической (компактной) модели неохлаждаемого теплового детектора болометрического типа (микроболометр), учитывающей особенности конструкции и используемых для его изготовления материалов, при проектировании схемотехнического и топологического решений интегральной схемы считывания данных с матрицы детекторов, расположенных в фокальной плоскости, с использованием библиотеки проектирования TSMC 0,18 мкм.

Ключевые слова: *неохлаждаемый тепловой детектор болометрического типа*, *микроболометр*, *инфракрасный детектор*, *оксид ванадия*, *матрица в фокальной плоскости*, *интегральная схема считывания*, *моделирование.*

Для цитирования: *Интегральная схема считывания данных с неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа* / Чан Ван Чиеу, Дао Динь Ха, П.Э. Новиков, К.В. Корсак, И.Ю. Ловшенко, В.Р. Стемпицкий // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 79–85. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_79. – EDN: FUIQSP

Abstract. An important task in the design of sensor devices, including thermography, is the development of systems that provide accurate processing of input data, as well as their conversion into a digital signal. The results of application of the generalized electrical (compact) model of the thermal uncooled detector bolometric type (microbolometer) implemented in the Verilog-A hardware description language, which takes into account the peculiarities of the design and materials used for its fabrication, in the design of circuit and topological solutions of the integrated circuit for reading data from a matrix of detectors located in the focal plane, using the TSMC 0.18 µm design library, are presented.

Keywords: *uncooled thermal detector of bolometric type*, *microbolometer*, *infrared detector*, *vanadium oxide*, *matrix in the focal plane*, *readout integral circuit*, *modeling.*

For citation: *Readout integrated circuit of thermal uncooled bolometric type detectors* / Tran Van Trieu, Dao Dinh Ha, P.E. Novikov, K.V. Korsak, I.Yu. Lovshenko, V.R. Stempitsky // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 79–85. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_79 (in Russian). – EDN: FUIQSP

Введение

Технологии визуализации инфракрасного спектра, появившиеся в 1950-х годах, позволяют видеть объекты, недоступные человеческому глазу, обнаруживать тепловую энергию или излучаемое объектами тепло. За последнее время тепловые детекторы и системы на их основе (тепловизоры) стали более доступнее для потребителей за счет снижению стоимости и улучшению эксплуатационных характеристик. Это позволило расширить области применения термографии: теперь кроме специального назначения и научных исследованиях тепловизоры стали применять для обследования электрооборудования, поиска утечек тепла, газа, нефти, автоматизации технологических процессов и мониторинга окружающей среды, построения систем технического зрения [1].

Двумя основными компонентами систем тепловизоров являются матрица в фокальной плоскости (МФП, англ. FPA – Focal Plane Array) и интегральная схема считывания (ИСС, англ. ROIC – Readout Integral Circuit). На рисунке 0.1 изображена общая структурная схема преобразования ИК-излучения в видеопоследовательность.

МФП состоит из массива чувствительных к ИК-диапазону пикселей (микроболометров), расположенных в фокальной плоскости линзы. Существует два основных типа ИК-пикселей: тепловые и фотонные [2].

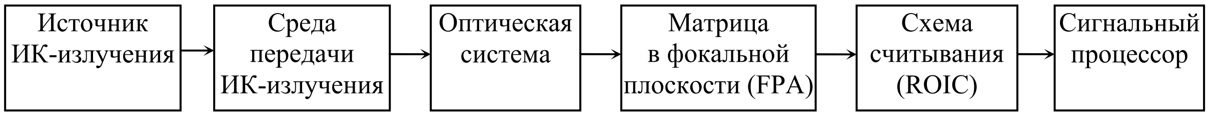


Рисунок 0.1 – Преобразование ИК-излучения в цифровой сигнал

Время отклика и чувствительность фотонных детекторов намного выше, чем у тепловых. Однако, для их функционирования с наилучшим соотношением сигнал / шум их необходимо охлаждать и поддерживать постоянную температуру. Обычно применяется криогенное охлаждение Дьюара с использованием жидкого азота, термоэлектрическое охлаждение, охлаждение Джоуля-Томсона и газоциркуляционное охлаждение. Все эти способы приводят к усложнению эксплуатации и обслуживания, увеличению стоимости и энергопотребления [3].

Тепловые детекторы ИК-излучения основаны на термоэлектрическом эффекте (термопары), тепловом расширении (ячейки Голея) или изменении сопротивления (микроболометры). Для увеличения чувствительности в микроболометре в качестве термочувствительного слоя применяется материал с очень малой теплоемкостью и большим температурным коэффициентом сопротивления [4].

ИСС представляет собой интерфейс между МФП и блоком обработки сигналов и выполняет функции интеграции, усиления и мультиплексирования слабых зарядов детектора.

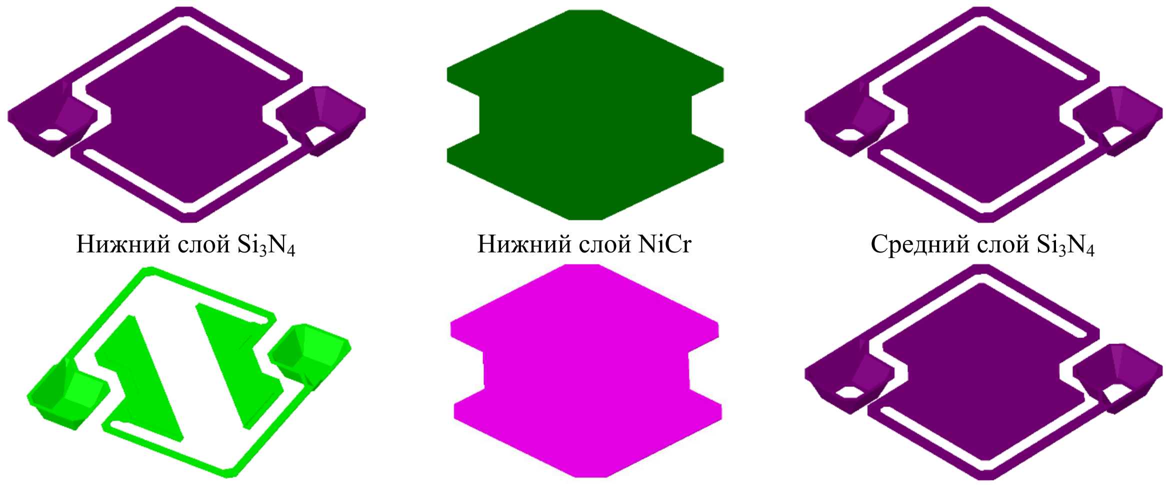
Малый ток, индуцированный ИК-излучением, интегрируется и отбирается в соответствующей элементарной ячейке. Затем выходные данные элементарных ячеек считываются построчно и преобразуются в последовательный поток битов с помощью схемы управления. Этот последовательный поток затем передается в процессор для постобработки и сглаживания.

Качество систем построения ИК-изображения зависит от характеристик МФП и ИСС. Одной из наиболее важных характеристик ИК-детекторов является обнаруживающая способность D^* – фоточувствительность на единицу активной площади детектора, позволяющая сравнивать разные детекторы между собой. Шум может исходить от фоновых колебаний, рабочих цепей или самого ИК-детектора. Фоновый шум доминирует над двумя другими типами шума, а также накладывает теоретический предел на D^* (т. н. фоновое ограничение детектора) [5].

1 Приборная структура

В качестве приборной структуры использована конструкция микроболометра, представляющая собой резонатор Фабри-Перо [6] и состоящая из многослойной мембраны, расположенной на расстоянии D (вакуумный зазор) от кремниевой подложки с нанесенным слоем отражающего покрытия (Al). Мембрана состоит из пленок проводящего и поглощающего (NiCr), диэлектрического (Si_3N_4) и термочувствительного (VO_x) материалов (рисунок 1.1, отражающий слой не показан). Воздушный зазор обеспечивается за счет опорных «ног», которые также являются контактами микроболометра.

Посредством компьютерного моделирования установлены оптимальные с точки зрения обеспечения наибольшей величины и равномерности коэффициента поглощения в диапазоне длин волн λ от 8 до 14 мкм: нижний слой Si_3N_4 – 70 нм; NiCr – 4 нм; средний слой Si_3N_4 – 200 нм;



Нижний слой Si_3N_4 Нижний слой NiCr Средний слой Si_3N_4

Верхний слой NiCr Термочувствительный слой VO_x Верхний слой Si_3N_4

Рисунок 1.1 – Конструктивные слои микроболометра термочувствительный слой VO_x – 250 нм; верхний слой Si_3N_4 – 150 нм. При этом величина среднего коэффициента поглощения составляет 0,86 о.е., а пиковое значение – 0,9991 о.е. (при λ = 8,9 мкм).

Исследование эксплуатационных характеристик микроболометра (определены зависимости температуры от напряжения, электрического сопротивления от температуры, временные диаграммы с профилем падающего излучения, в виде теплового потока, а также приложенного напряжения и т.д.) выполнено посредством применения термомеханического, электротермомеханического и стационарного теплового анализов.

2 Разработка компактной (электрической) модели

На языке описания аппаратуры Verilog-A реализована компактная модель микроболометра. Модель содержит блок расчета выходного напряжения в зависимости от входного сигнала V и теплового потока (ИК-излучения). В модели реализован блок ожидания изменения напряжения на микроболометре и/или величины теплового потока, а также определения процесса, который будет запущен в результате наступления такого события (нагрев или остывание приборной структуры). Реальная температура болометра определяется как сумма номинальной температуры и ее приращения в зависимости от приложенного напряжения ΔT_1 и теплового потока ΔT_2 по выражению

$$T_{real} = T_{nom} + \Delta T_1 + \Delta T_2.$$

Вклад каждой составляющей рассчитывается исходя из устоявшегося режима работы болометра при пропускании постоянного тока. Так, максимальное значение приращения температуры при протекании тока через болометр $\mathrm{d}T_{1\,\max}$ определяется как

$$\mathrm{d}T_{1\,\max} = f_1(V) - f_2(V),$$

где $f_1(V)$ и $f_2(V)$ – функции, аппроксимирующие зависимость приращения температуры от приложенного напряжения, полученную в результате приборного моделирования, и ее остаточного члена (рисунок 2.1).

Максимальное значение приращения температуры при воздействии теплового потока $\mathrm{d}T_{2\,\max}$ имеет линейную зависимость от величины теплового потока (рисунок 2.2).

Величина сопротивления микроболометра рассчитывается по аппроксимирующей функции зависимости, полученной при анализе результатов приборного моделирования (рисунок 2.3).

Для учета динамических изменений введены функции зависимости нагрева и остывания микроболометра от временного шага для эффекта самонагрева и поглощения тепла от внешнего источника $f1$, $f2$, $f3$ и $f4$ соответственно. Функции рассчитываются по аппроксимационным зависимостям, полученным на основе временных диаграмм в программном продукте приборного моделирования. На каждом временном шаге происходит определение текущего изменения температуры в зависимости от предыдущего временного шага.

На рисунке 2.4 представлено сравнение результатом моделирования в программных продуктах приборного и схемотехнического моделирования.

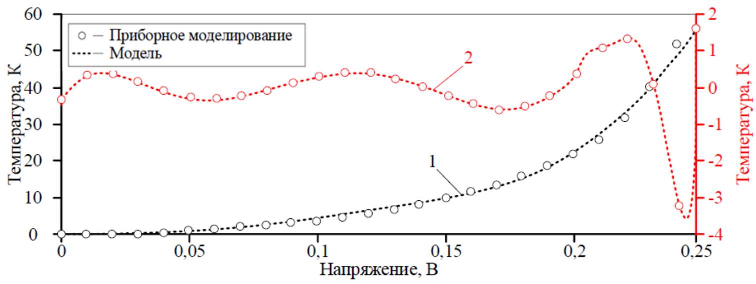


Рисунок 2.1 – Зависимость приращения температуры от приложенного напряжения (1) и разницы её величины со значениями функции её аппроксимирующей (2)

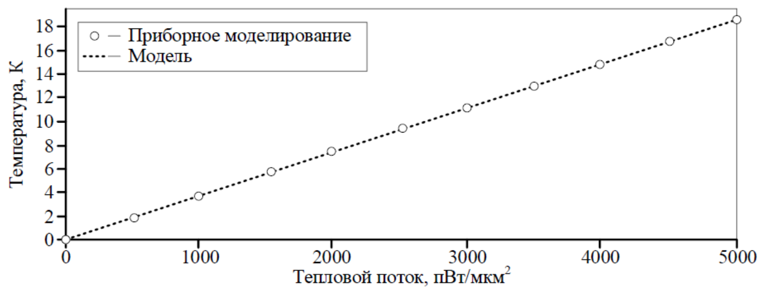


Рисунок 2.2 – Зависимость приращения температуры от теплового потока

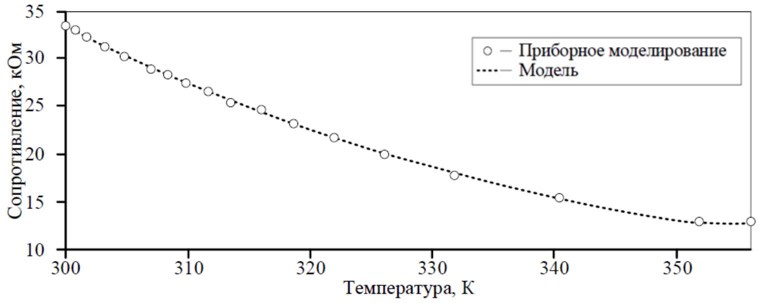


Рисунок 2.3 – Зависимость величины сопротивления от температуры микроболометра

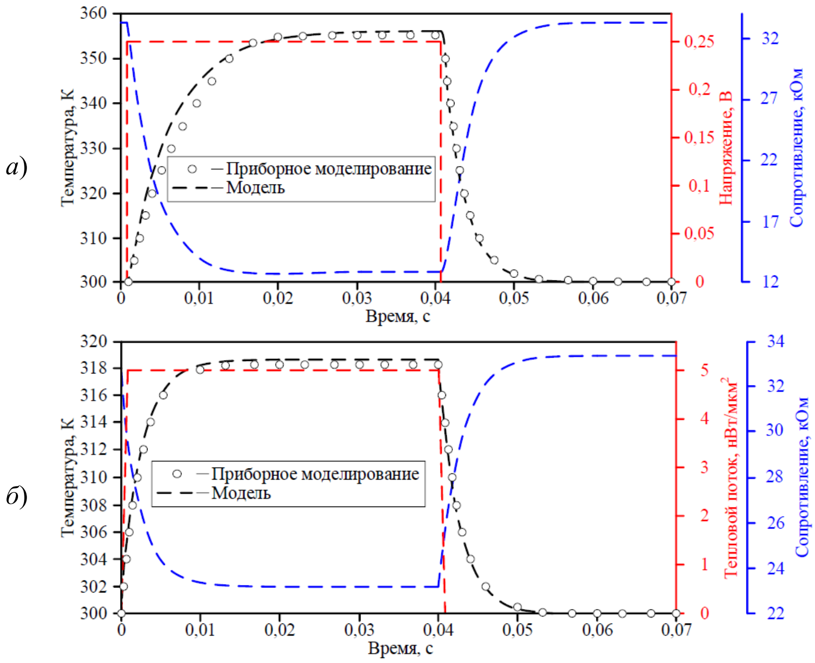


Рисунок 2.4 – Сравнение результатов моделирования при подаче импульса считывания (*а*) и воздействии теплового потока (*б*)

3 Реализация схемы считывания

Представление массива неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа со схемой считывания, реализованной посредством оптического разделения эталонного и активного пикселя, показана на рисунке 3.1. Буквой *S* обозначены ключевые переключатели, реализованные по КМОП-технологии.

Изменение сопротивления микроболометра, связанное с эффектом самонагрева, намного больше вызванного воздействием теплового потока (ИК-излучения). Для компенсации такого эффекта применяют полумостовые схемы резистивного делителя: постоянная часть тока детектора компенсируется с помощью эталонного микроболометра, располагающегося в защищенном от ИК-излучения месте на подложке.

Трансимпедансный усилитель (ТИУ) является основным каскадом усиления в схеме и предназначен для преобразования токового сигнала, генерируемого датчиком, в сигнал напряжения, который можно обрабатывать и анализировать [7]. Он состоит из усилителя и конденсатора обратной связи. Резистор обратной связи заменен конденсатором обратной связи для достижения емкостного трансимпедансного усиления и стабилизации коэффициента усиления и частотной характеристики схемы. Обычно схема ТИУ также реализует метод интегрирования для преобразования текущего сигнала в напряжение, пропорциональное накопленному заряду. Интегрирующий конденсатор подключается параллельно конденсатору обратной связи, а переключатель используется для сброса напряжения на интегрирующем конденсаторе в начале каждого периода интегрирования. Операция сброса гарантирует, что выходное напряжение будет пропорционально заряду, генерируемому датчиком в течение времени интегрирования. Схема считывания ТИУ имеет ряд преимуществ, включая высокий коэффициент усиления, низкий уровень шума и способность обрабатывать малые сигналы.

Выходной сигнал ТИУ все еще имеет малую амплитуду и обычно требует дополнительного усиления. Для этих целей применяют малошумящие усилители [8].

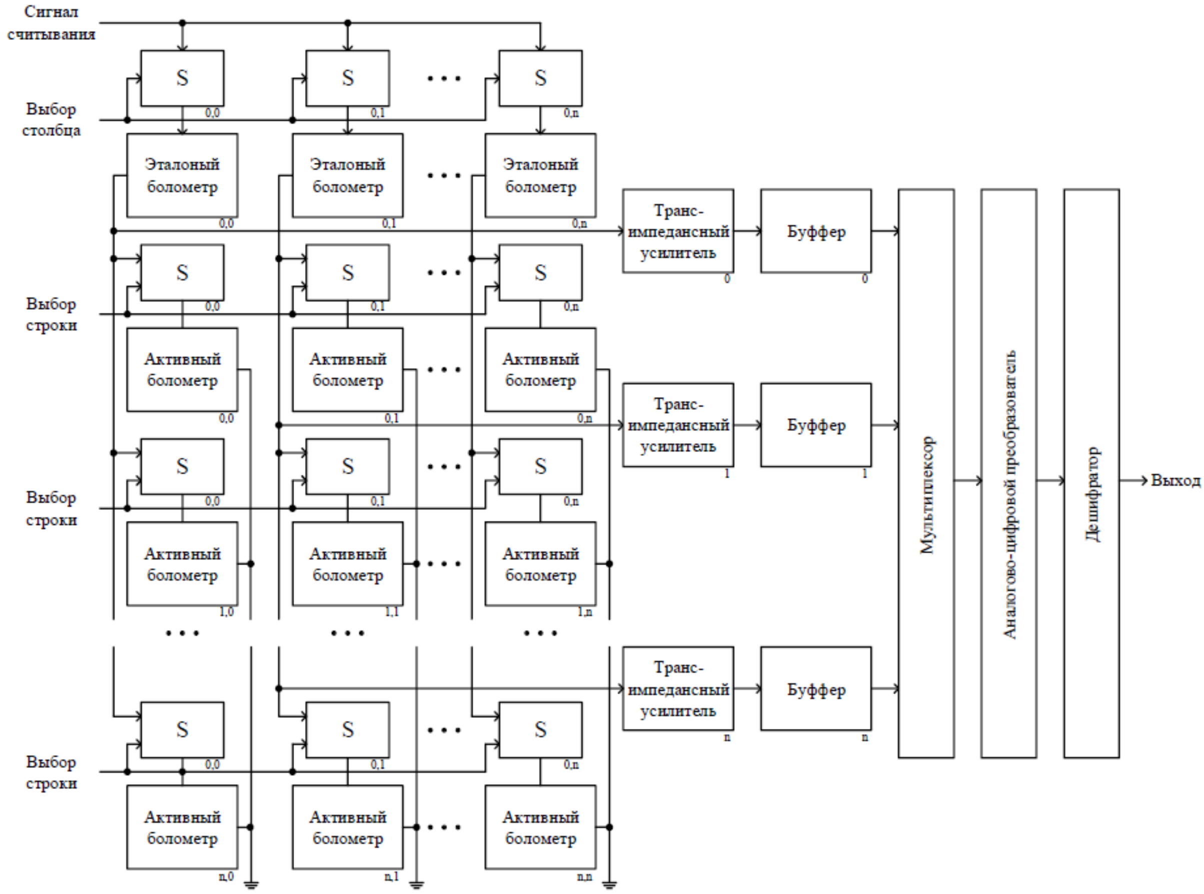


Рисунок 3.1 – Структурная схема теплового детектора, включающего МФП и ИСС

Далее сигнал поступают в схему выборки и хранения (буфер), которая предназначена для запоминания мгновенного значения аналогового сигнала и его хранения в течение времени необходимого для его дальнейшего преобразования.

Для передачи сигналов с каждого столбца МФП на вход АЦП необходимо применение аналогового мультиплексора (коммутатор). Его особенность заключается в формировании электрического соединения выбранного входа с выходом и обеспечении низкого сопротивления между ними. Таким образом сигналы могут передаваться в обе стороны. Выбор желаемого входа осуществляется подачей соответствующей комбинации управляющих сигналов.

Для обеспечения работы с данными, получаемыми от микроболометров, необходимо их дискретизация (выбор значений через равные промежутки времени из непрерывного потока данных), которая выполняется в АЦП [9]. Для реализации выбрана схема параллельного АЦП (Flash АЦП), которые отличаются большим быстродействием. Параллельный n-разрядный АЦП состоит из $2n$ резисторов и $2n – 1$ компараторов. На каждый компаратор подается опорное напряжение, значение которого для соседних точек отличается на величину, соответствующую одному младшему значащему разряду (более старшие разряды – в верхних по схеме элементах). На выходе $2n – 1$ компараторов формируется выходной код, называемый «код термометра». В действительности, необходимо преобразовать сигнал при помощи шифратора в n-разрядный двоичный код.

Для избавления от избыточной информации проведено моделирование одного пикселя. На рисунке 3.2 представлена тестовая схема считывания микроболометра, а на рисунке 3.3 – результат моделирования.

Сигнал out показывает напряжение между активным пикселем микроболометра и эталонным. Уровень напряжения изменяется в зависимости от уровня сигнала net5, который представляет собой тепловой поток. Сигнал AMP является обработанным сигналом out через предусилитель и усилитель. Сигнал b является интегрированным сигналом AMP через блок SH. Выход блока SH соединён со входом в АЦП. Сигналы x<0:4> являются выходами АЦП.

Для представленной на рисунке 3.1 системы с использованием библиотеки проектирования TSMC 0,18 мкм CMOS MS/RF 1.8/3.3V PDK разработано топологическое представление, которое содержит МФП и ИСС на одном кристалле.

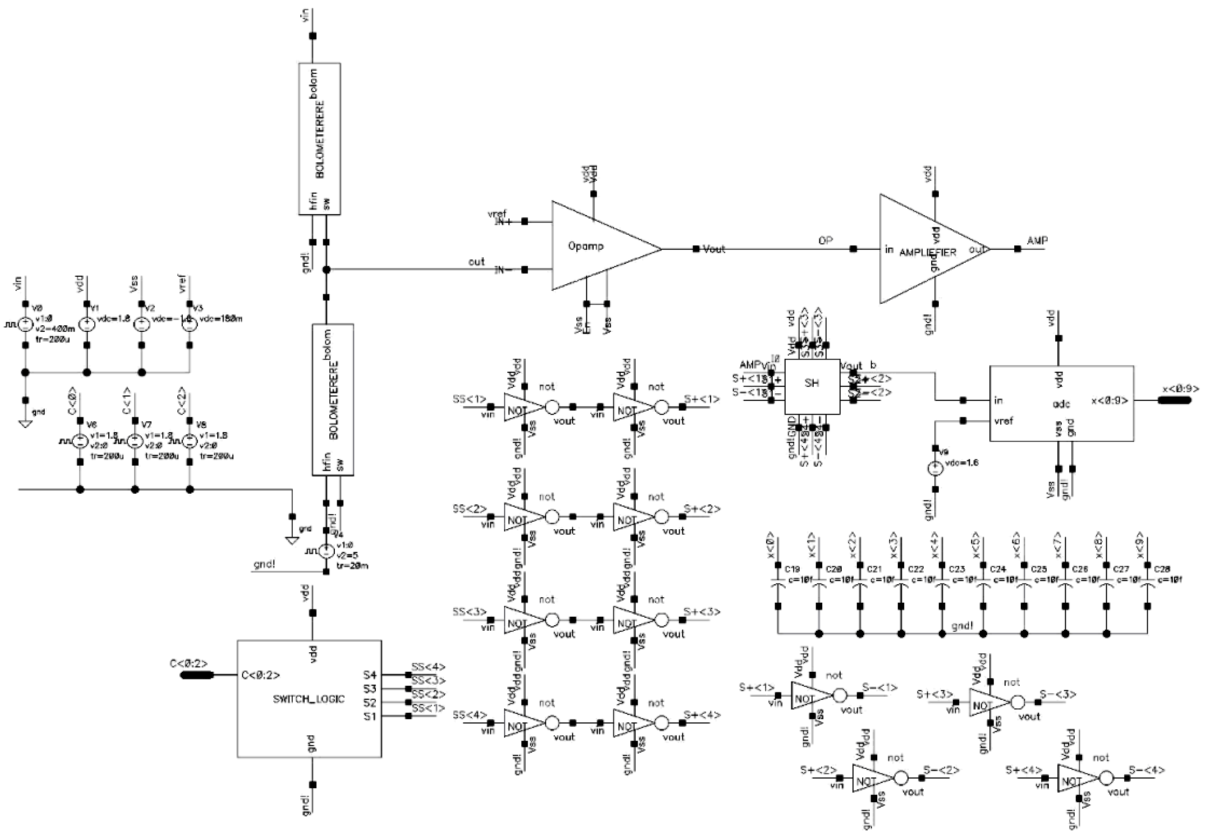


Рисунок 3.2 – Тестовая схема считывания микроболометра

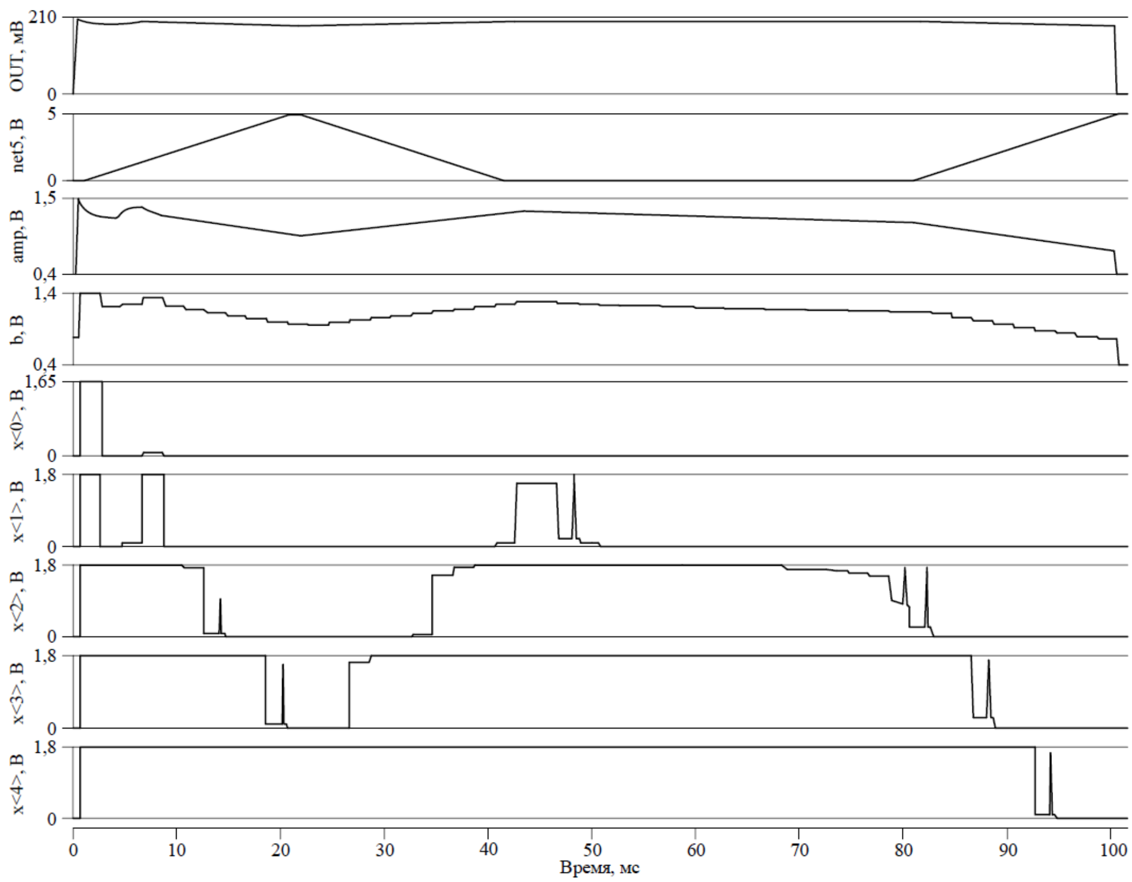


Рисунок 3.3 – Временная диаграмма тестовой схемы считывания микроболометра

Площадь кристалла составляет 20,4 мм^2. Моделирование электрических характеристик микроболометра осуществлялось с использованием разработанной электрической модели.

Результаты компьютерного моделирования предлагаемой схемы с учетом паразитных компонентов, вносимых топологическим решением, увеличивают задержки переключения на 14%, но при этом не нарушается работоспособность схемотехнического решения.

Данные компьютерного моделирования схемотехнического решения для приема, усиления и обработки данных сенсорных устройств, состоящей из интегрированных на одном кристалле с использованием библиотеки проектирования TSMC 0,18 мкм CMOS MS/RF 1,8/3,3V PDK схемы считывания данных с матрицы микроболометров показали высокую эффективность разработанной электрической модели, а также хорошее соответствие полученных результатов функциональным параметрам компонентов схемы обработки сигналов.

Заключение

Проведена интеграция в программный продукт проектирования интегральных микросхем компактной модели неохлаждаемого теплового детектора болометрического типа, реализованной на языке описания аппаратуры Verilog-A, которая позволяют учитывать при схемотехническом моделировании влияние эффекта самонагрева и внешнее воздействие теплового потока.

В рамках тестирования электрической модели микроболометра в среде программного комплекса схемотехнического моделирования установлено, что погрешность моделирования характеристик исследуемых приборных структур не превышает 1% и 2% по сравнению с результатами приборного моделирования с использованием моделей переноса носителей заряда для статических и динамических характеристик соответственно.

Результаты компьютерного моделирования схемотехнического решения интегральной схемы считывания данных микроболометров с использованием библиотеки проектирования TSMC 0,18 мкм CMOS MS/RF 1,8/3,3V PDK показали высокую эффективность разработанной электрической модели микроболометра, а также хорошее соответствие полученных результатов функциональным параметрам компонентов схемы обработки сигналов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Performance and applications of cooled composite bolometers in the field of ionizing radiation metrology* / N. Coursol [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 1992. – Т. 312. – № 1-2. – С. 24–33.

2. *Rogalski*, *A*. Challenges of small-pixel infrared detectors: a review / A. Rogalski, P. Martyniuk, M. Kopytko // Reports on Progress in Physics. – 2016. – Т. 79. – № 4. – С. 046501.

3. *Performance and applications of cooled composite bolometers in the field of ionizing radiation metrology* / N. Coursol [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 1992. – Vol. 312, № 1-2. – P. 24–33.

4. *Winter*, *M.R.* Oxide materials with low thermal conductivity / M.R. Winter, D.R. Clarke // Journal of the American Ceramic Society. – 2007. – Т. 90, № 2. – С. 533–540.

5. *Ограничение фоном мощности эквивалентной шуму для приемника одиночных ИК фотонов на основе сверхпроводниковых детекторов, сопряженных с одномодовым волокном* / К.В. Смирнов [и др.] // Журнал радиоэлектроники. – 2015. – № 5. – 14 с. – Режим доступа: http://jre.cplire.ru/jre/may15/3/text.pdf. – Дата доступа: 11.09.2023.

6. *Smith*, *P.W.* A Bistable Fabry Perot Resonator / P.W. Smith, E.H. Turner // Applied Physics Letters. – 1977. – № 30 (6). – С. 280–281.

7. *Transimpedance amplifier for high sensitivity current measurements on nanodevices* / G. Ferrari [et al.] // IEEE Journal of Solid-State Circuits. – 2009. – Т. 44, №. 5. – С. 1609–1616.

8. *CMOS low-noise amplifier design optimization techniques* / T.K. Nguyen [et al.] // IEEE Transactions on microwave theory and techniques. – 2004. – Т. 52, № 5. – С. 1433–1442.

9. *Matsuzawa*, *A*. Trends in high speed ADC design / A. Matsuzawa // 2007 7th International Conference on ASIC. – IEEE, 2007. – С. 245–248.

Исследования выполняются при финансовой поддержке и в рамках обеспечения решения задач государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (*задание* 3.1.03).

Поступила в редакцию 16.01.2024.

Информация об авторах

Чан Ван Чиеу – аспирант
Дао Динь Ха – к.т.н., старший научный сотрудник
Новиков Павел Эдуардович – инженер-электроник
Корсак Кирилл Витальевич – мл. научный сотрудник
Ловшенко Иван Юрьевич – старший преподаватель, магистр технических наук, заведующий лабораторией
Стемпицкий Виктор Романович – к.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник

УДК 004.021 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_86
EDN: CAFDUQ

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ УПРАВЛЕНИЯ ПОРЯДКОМ ВЫПОЛНЕНИЯ ЗАКАЗОВ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ

О.М. Демиденко[1], **А.И. Якимов**[2], **Е.М. Борчик**[2], **Е.А. Якимов**[2], **Д.А. Денисевич**[2]

[1]*Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины*
[2]*Белорусско-Российский университет*, *Могилев*

SOLVING THE PROBLEM OF ORDER FULFILLMENT MANAGEMENT OF AN INDUSTRIAL ENTERPRISE

O.M. Demidenko[1], **A.I. Yakimov**[2], **E.M. Borchik**[2], **E.A. Yakimov**[2], **D.A. Denisevich**[2]

[1]*Francisk Skorina Gomel State University*
[2]*Belarusian-Russian University*, *Mogilev*

Аннотация. Рассматривается производственный процесс выполнения заказов с параметрами, требующими переналадки оборудования. Задача определения оптимальной стратегии переналадки производственного оборудования является задачей оптимизации, которая сформулирована как задача коммивояжера. При решении такой задачи узлами графа являются заказы, дугами – переналадки с известной стоимостью при переходе от одного заказа к другому. Критерий оптимизации – минимальная общая стоимость переналадок оборудования. На основе матрицы стоимостей переналадок оборудования при выполнении заказов с известными параметрами проведены исследования решения задачи с помощью генетического алгоритма. Даны примеры оценки общей стоимости переналадок для заказов, имеющих несколько параметров с разными уровнями. Представлены шаги реализации генетического алгоритма для решения поставленной задачи, показаны результаты экспериментов.

Ключевые слова: *промышленное предприятие*, *заказы с параметрами*, *переналадка оборудования*, *оптимизация*, *задача коммивояжера*, *полносвязный граф*, *генетический алгоритм*.

Для цитирования: *Решение задачи управления порядком выполнения заказов промышленного предприятия* / О.М. Демиденко, А.И. Якимов, Е.М. Борчик, Е.А. Якимов, Д.А. Денисевич // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 86–92. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_86. – EDN: CAFDUQ

Abstract. The production process of fulfilling orders with parameters that require readjustment of equipment has been studied. The problem of determining the optimal strategy for readjustment of production equipment is an optimization problem, which is formulated as a traveling salesman problem. When solving this problem, the nodes of the graph are orders, the arcs are changeovers with known cost when moving from one order to another. The optimization criterion is the minimum total cost of equipment changeovers. Based on the matrix of the cost of equipment changeovers during the execution of orders with known parameters, the research of the problem solution with the help of a genetic algorithm was carried out. The examples are given for estimating the total cost of changeovers for orders with several parameters with different levels. The implementation steps of the genetic algorithm for solving the problem are presented, and the results of the experiments are shown.

Keywords: *industrial enterprise*, *orders with parameters*, *equipment changeover*, *optimization*, *traveling salesman problem*, *fully connected graph*, *genetic algorithm*.

For citation: *Solving the problem of order fulfillment management of an industrial enterprise* / O.M. Demidenko, A.I. Yakimov, E.M. Borchik, E.A. Yakimov, D.A. Denisevich // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 86–92. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_86 (in Russian). – EDN: CAFDUQ

Введение

В статье рассматривается производственный процесс последовательного выполнения заказов, которые характеризуются множеством параметров. Такими параметрами заказа могут быть, например, цвет продукции, размеры, вес, форма и др. Для каждого параметра заказа предусматриваются уровни (например, для цвета – красный, белый, желтый, зеленый и др.) и определяются матрицы стоимостей переналадок производственного оборудования при переходе от одного уровня к другому.

Переналадка оборудования – это изменение настроек или компонентов производственного оборудования для переключения между производством разных типов продукции. Переналадка может включать в себя замену инструментов, установку новых программных настроек или комбинацию этих и других действий для подготовки оборудования к производству определенного изделия. При этом для переналадки оборудования требуются опытные работники – специалисты в области производства и управления производственными процессами, чтобы быстро и эффективно перенастроить машины.

Выходными параметрами производственного процесса являются, например, стоимость произведенной продукции; время, затраченное на ее производство, стоимость переналадок оборудования при выполнении заказов. При составлении плана выполнения значительного количества заказов возникает сложность планирования последовательности выполнения заказов с учетом требуемых переналадок оборудования. Переналадка оборудования регламентируется определенным временем, в течение которого заказы на определенных этапах не выполняются. Нерациональный порядок выполнения заказов на различных этапах производственного процесса может привести к повышению стоимости продукции из-за переналадок и/или долгосрочного выполнения на одном из этапов, что приведет к переносу сроков выполнения. Задача сокращения сроков выполнения заказов в производстве решается, например, путем разработки и использования автоматизированной системы планирования производства [1]. Эффект достигается за счет автоматизации выполнения трудоемких и рутинных операций по ведению оснастки.

Известно решение задачи для сокращения непроизводительных потерь времени в многономенклатурных производствах, связанных с необходимостью переналадок оборудования при смене ассортимента продукции [2]. Разработана модель производственной ситуации в виде комбинаторной задачи поиска простой цепи в полном ориентированном графе с нагруженными дугами. Предложен эвристический метод решения задачи, использующий ряд приемов, позволяющих существенно сократить объем перебора при поиске варианта очередности обработки небольшого количества различных видов продукции, приемлемого по критерию суммарной длительности переналадок.

Выполнены исследования по разработке инструментов для быстрой переналадки оборудования SMED (Single Minute Exchange of Dies). В SMED время, затрачиваемое на замену формы или штампа, должно составлять менее десяти минут. Это повышает производительность за счет сокращения времени, затраченного для переналадки производственного оборудования [3].

Важным направлением является исследование в теории производственных расписаний задачи коммивояжера TSP (Travelling Salesman Problem), к которой сводится поиск оптимальной последовательности выполняемых заказов при их значительном количестве. Например, показано, что метаэвристика POPMUSIC (Partial OPtimization Metaheuristic Under Special Intensification Conditions) очень эффективна для решения различных сложных комбинаторных задач [4]. При этом разрабатываются эвристические приемы, позволяющие сократить выбор дуг исследуемого графа для получения лучшего решения за короткое время.

В задаче TSP с количеством узлов графа более тысячи используются современные методы машинного обучения [5]. Для сокращения временных затрат ограничивается пространство поиска при получении решения и, соответственно, снижается вычислительная нагрузка. Модель машинного обучения используется для выбора высоковероятных дуг при конструировании лучшего решения.

Масштабируемость алгоритмов решения проблемы коммивояжера (TSP) для обработки крупномасштабных задач является актуальной проблемой. Проведены исследования с миллионом узлов графа и ограничением времени вычислений до одного часа. Предложены алгоритмы, применяющие методы кластеризации узлов графа и использования генетического алгоритма для каждого кластера в отдельности на основе концепции «разделяй и властвуй» [6], [7]. Другим направлением сокращения времени построения лучшего решения для больших данных является применение облачных вычислений [8].

В представленной работе рассматривается задача определения оптимального порядка выполнения заказов, при котором минимизируется суммарная стоимость переналадок оборудования на основе формализации проблемы в виде задачи коммивояжера и применения генетического алгоритма для большого количества заказов, имеющих несколько параметров с разными уровнями.

1 Материалы и модели

Пусть имеется мультимножество

$$Z_M = \{z_1, z_2, ..., z_i, ..., z_{|Z_M|}\},$$

$i = 1, 2, ..., |Z_M|$ заказов с множеством

$$L = \{l_1, l_2, ..., l_q, ..., l_{|L|}\}$$

параметров, требующих переналадки производственного оборудования, на котором заказы должны быть выполнены. Параметры $l_q \in L,\ \ q = 1, 2, ..., |L|$ имеют множество дискретных значений

$$K^{l_q} = \left\{k_1^{l_q}, k_2^{l_q}, ..., k_h^{l_q}, ..., k_{|K^{l_q}|}^{l_q}\right\},\ \ q = 1, 2, ..., |L|,$$

которые будем именовать уровнями.

Каждый заказ требует определенной настройки оборудования, которая определяется разной стоимостью c_{ij} в зависимости от требуемой переналадки при переходе от заказа z_i к заказу z_j с другими уровнями параметров (рисунок 1.1).

Заказы с одинаковыми уровнями параметров $z_{i1} = z_{i2} = z_{i3}$ не требуют переналадки и объединены в один кластер z_i. Аналогично заказы $z_{j1} = z_{j2}$ объединены в кластер z_j (рисунок 1.1). Таким образом, рассматривается множество Z, $|Z| < |Z_M|$ заказов с разными уровнями параметров.

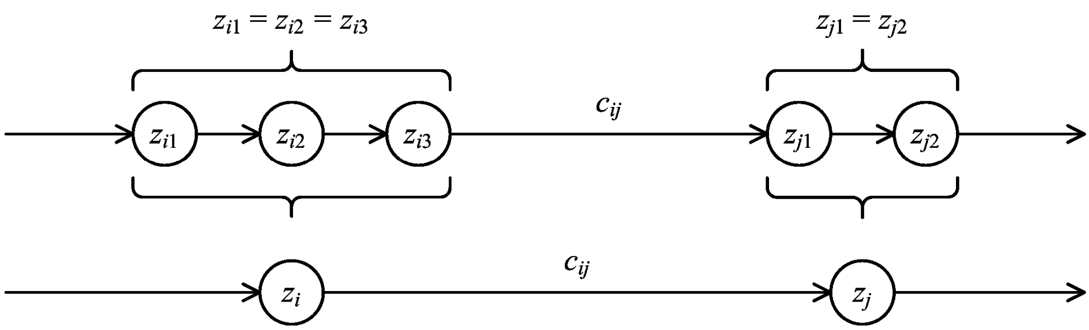


Рисунок 1.1 – Стоимость переналадки оборудования c_{ij} при переходе в процессе производства от заказа z_i к заказу z_j

Цель состоит в определении оптимальной последовательности выполнения заказов и переналадок оборудования, чтобы минимизировать стоимость настройки оборудования и общую стоимость выполнения множества заказов.

Задача определения оптимальной стратегии переналадки производственного оборудования является задачей оптимизации, которая может быть сформулирована как задача коммивояжера.

Математически задача определяется следующим образом: пусть имеется множество узлов графа, каждая из которых соответствует определенному заказу. Между узлами есть дуги, которые соответствуют переналадкам оборудования. Каждая переналадка оборудования имеет свою стоимость (может быть представлена временными параметрами). Требуется найти путь минимальной стоимости в этом графе, который будет соответствовать оптимальной последовательности выполнения заказов и переналадок оборудования.

Решение этой задачи может быть получено с использованием алгоритмов решения задачи коммивояжера, таких как жадный алгоритм, динамическое программирование, метод ветвей и границ, эволюционные алгоритмы. При этом необходимо учитывать все возможные варианты переналадок оборудования.

Для формализации производственного процесса введем обозначения матриц стоимостей переналадки параметров оборудования. В общем виде будет рассматриваться случай с $|L|$ параметрами, каждый из которых имеет $|K^{l_q}|$, $q = 1, 2, ..., |L|$ различных уровней. Например, в общем случае параметр l_1 имеет $|K^{l_1}|$ уровней, параметр l_2 имеет $|K^{l_2}|$ уровней и т. д. Матрица $|P_q|$ стоимостей переналадки для параметра l_q между уровнями в общем случае:

$$P_q = (p_{qij})_{|K^{l_q}|\times|K^{l_q}|}, \;\; p_{qij} \in R;\; p_{qij} \neq p_{qji};$$

$$p_{qij} = 0, i = j; q = 1,...,|L|, \;\; i, j = 1,...,|K^{l_q}|,$$

где $|L|$ – количество параметров, $|K^{l_q}|$ – количество уровней q-го параметра, $|L|, |K^{l_q}| \in N$, $p_{qij} \in R$ – стоимость переналадки для q-го параметра при переходе с уровня i на уровень j (например, стоимость перехода в крашении с белого на красный цвет отличается от стоимости перехода с красного цвета на белый, т. е. $p_{qij} \neq p_{qji}$).

В терминах задачи о коммивояжере будем рассматривать стоимость переналадки оборудования между выполняемыми заказами, как расстояние между заказами c_{ij} (рисунок 1.1). Пусть имеется $|Z|$ заказов с параметрами:

$$Z = \begin{pmatrix} z_1 \\ ... \\ z_{|Z|} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & ... & l_{1|L|} \\ ... & ... & ... & ... \\ l_{|Z|1} & l_{|Z|2} & ... & l_{|Z||L|} \end{pmatrix}.$$

Каждый заказ z_i характеризуется параметрами с соответствующими уровнями:

$$z_i = (l_{i1}, l_{i2}, ..., l_{i|L|}),\; i = 1, \ldots, |Z|.$$

Тогда матрица расстояний C между заказами принимает вид:

$$C = (c_{ij})_{|Z|\times|Z|}, c_{ij} \in R; c_{ij} = 0,$$

$$i = j; i,j = 1,...,|Z|; |Z| \in N,$$

где $|Z|$ – количество заказов.

Стоимости переналадки оборудования c_{ij} при переходе в процессе производства от заказа z_i к заказу z_j могут быть рассчитаны по следующей формуле:

$$c_{ij} = \sum_{q=1}^{|L|} p_{qij},\; i,j = 1,...,|Z|,$$

где p_{qij} – стоимость переналадки оборудования для q-го параметра, $q = 1, 2, ..., |L|$.

Пример. Пусть рассматривается случай с четырьмя параметрами $(|L| = 4)$, каждый из которых имеет четыре уровня $(|K^{l_q}| = 4,\; q = 1,..., 4)$. Матрица стоимостей переналадки оборудования между уровнями параметров имеет вид:

$$P_q = \begin{array}{c} \\ k_1^{l_q} \\ k_2^{l_q} \\ k_3^{l_q} \\ k_4^{l_q} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} k_1^{l_q} & k_2^{l_q} & k_3^{l_q} & k_4^{l_q} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & p_{i12} & p_{i13} & p_{i14} \\ p_{i21} & 0 & p_{i23} & p_{i24} \\ p_{i31} & p_{i32} & 0 & p_{i34} \\ p_{i41} & p_{i42} & p_{i43} & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \; q = 1, \ldots, 4.$$

Матрицы стоимости переналадки между уровнями для каждого из параметров:

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 5 & 8 & 7 \\ 10 & 0 & 9 & 6 \\ 5 & 10 & 0 & 3 \\ 9 & 10 & 6 & 0 \end{pmatrix}, \; P_2 = \begin{pmatrix} 0 & 9 & 9 & 1 \\ 5 & 0 & 1 & 4 \\ 2 & 5 & 0 & 2 \\ 3 & 7 & 7 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P_3 = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 3 & 6 \\ 10 & 0 & 10 & 2 \\ 5 & 6 & 0 & 8 \\ 5 & 8 & 3 & 0 \end{pmatrix}, \; P_4 = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 5 & 9 \\ 5 & 0 & 1 & 9 \\ 7 & 5 & 0 & 2 \\ 10 & 8 & 5 & 0 \end{pmatrix}.$$

Параметру l_1 соответствуют номера строк и столбцов матрицы P_1, параметру l_2 соответствуют номера строк и столбцов матрицы P_2 и т. д.

Параметры четырех заказов с соответствующими уровнями представлены в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Матрица уровней параметров четырех заказов

Заказы	Уровень параметра			
	l_1	l_2	l_3	l_4
z_1	3	4	2	2
z_2	4	1	1	2
z_3	3	3	3	2
z_4	2	2	4	3

Требуется определить стоимость оптимальной последовательности выполнения заказов.

Решение. Найдем стоимость c_{12} переналадки между заказами z_1 и z_2 (таблица 1.1).

Шаг 1. В матрице P_1 находим значение $p_{134} = 3$.

Шаг 2. В матрице P_2 находим значение $p_{241} = 3$.

Шаг 3. В матрице P_3 находим значение $p_{321} = 10$.

Шаг 4. В матрице P_4 находим значение $p_{422} = 0$.

Шаг 5. Находим суммарное значение переналадок по всем параметрам:

$$c_{12} = p_{134} + p_{241} + p_{321} + p_{422} = 16.$$

Аналогично по шагам 1–5 найдем стоимость c_{21} переналадки между заказами z_2 и z_1:

$$c_{21} = p_{143} + p_{214} + p_{312} + p_{422} = 6 + 1 + 7 + 0 = 14.$$

Повторяя шаги 1–5 заполняем матрицу расстояний C между заказами, по которой определим оптимальный порядок выполнения заказов, минимизирующий суммарную стоимость переналадок оборудования:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 16 & 17 & 20 \\ 14 & 0 & 18 & 25 \\ 13 & 10 & 0 & 24 \\ 26 & 21 & 18 & 0 \end{pmatrix}.$$

Минимальная стоимость C_Z последовательности выполнения заказов z_4, z_3, z_2, z_1:

$$C_Z = C\,(z_4, z_3, z_2, z_1) = c_{43} + c_{32} + c_{21} = 42.$$

Для решения задачи определения оптимального порядка выполнения заказов z_i, $i = 1, ..., |Z|$, при котором суммарная стоимость переналадок оборудования будет минимальной, предлагается применение алгоритма случайного поиска на основе генетического алгоритма. В качестве хромосом при решении данной задачи предлагается использовать вектора последовательностей заказов, характеризуемых суммарными стоимостями переналадок оборудования.

2 Эксперименты и методы

Генетический алгоритм – это алгоритм случайного поиска, который моделирует естественную эволюцию. Широко используется для решения *NP*-полных задач в различных предметных областях, которые в свою очередь не могут быть решены алгоритмами перебора.

Чтобы применить генетический алгоритм для решения задачи оптимизации, необходимо установить, что является популяцией, хромосомой, геном, выбрать способ кодирования решений.

Популяция – это множество возможных решений поставленной задачи, образующее пространство поиска. В популяции представлены хромосомы – наборы параметров, определяющие предлагаемое возможное решение. Ген – один из параметров хромосомы. Скрещивание – операция, при которой хромосомы обмениваются генами. Мутация – случайная перестановка нескольких генов в хромосоме. Приспособленность – оценка хромосомы согласно целевой функции. Поколение – одна итерация алгоритма.

Для решения поставленной задачи хромосомой представляется множество заказов, указанные в порядке следования их выполнения на оборудовании. Каждый ген хромосомы – это отдельный заказ, который не может повторяться дважды в одной хромосоме. Например, хромосомы из семи заказов могут быть представлены в виде {5, 2, 1, 4, 3, 7, 6}. Приспособленностью хромосомы будет являться сумма переналадок оборудования при выполнении заказов.

Пусть имеется семь заказов. Матрица стоимостей переналадок оборудования при выполнении заказов представлена в таблице 2.1.

Генетический алгоритм поиска оптимального порядка выполнения заказов реализуется следующей последовательностью шагов.

Таблица 2.1 – Матрица стоимостей переналадки оборудования

№ заказа	1	2	3	4	5	6	7
1	0	16	17	20	16	15	15
2	14	0	18	25	12	17	13
3	13	10	0	24	10	16	19
4	26	21	18	0	10	23	18
5	23	19	7	15	0	15	26
6	17	25	18	27	17	0	10
7	20	20	14	27	21	7	0

Шаг 1. Установить параметры для поиска наилучшего решения: размер популяции, количество поколений, процент мутации.

Шаг 2. Сгенерировать начальную популяцию. В качестве первой хромосомы в популяции установим гены (заказы) в порядке возрастания их номера {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7}. Генерируем следующие хромосомы в популяции, переставляя гены случайным образом, пока не достигнем необходимого размера популяции.

Шаг 3. Вычислить для каждой хромосомы в популяции, согласно значениям, приведенным в таблице 2.1, приспособленность (сумму стоимостей переналадок оборудования).

Шаг 4. Применить операцию скрещивания.

4.1 Выбрать случайным образом пару хромосом. Пусть парой выбранных хромосом являются *Ch*1: {1, 6, 4, 3, 2, 7, 5} и *Ch*2: {5, 1, 2, 7, 4, 6, 3} со значениями функции приспособленности 120 и 119 соответственно (рисунок 2.1).

Хромосомы	Гены							Приспособленность
*Ch*1	1	5	7	3	6	4	2	120
*Ch*2	1	6	2	4	3	5	7	119
*Ch*11	1	5	2	4	3	7	6	104
*Ch*22	1	6	7	3	4	2	5	96

Рисунок 2.1 – Применение операции скрещивания

4.2 Сгенерировать точку разрыва (выделена полужирно на рисунке 2.1).

4.3 Часть генов *Ch*1 до точки разрыва, копируем в *Ch*11 (новую хромосому).

4.4 Часть генов *Ch*2 после точки разрыва, копируем в *Ch*11, если данные гены еще не были унаследованы.

4.5 Если не все гены *Ch*11 были заполнены, то выбираем не унаследованные гены *Ch*1;

4.6 Аналогичным образом формируем гены *Ch*22. Копируем часть генов *Ch*2 до точки разрыва, часть *Ch*1 после точки разрыва, заполняем не унаследованными генами *Ch*2.

Интерпретация хромосом означает получение фенотипа из генотипа, т. е. определение порядка выполнения заказов (рисунок 2.2).

Шаг 5. Применить операцию мутации. На данном шаге осуществляем обмен двух сгенерированных генов в случайной хромосоме.

Шаг 6. Добавить полученные хромосомы-потомки (*Ch*11, *Ch*22 на рис.3) в популяцию, образовавшуюся после операции скрещивания на шаге 4.

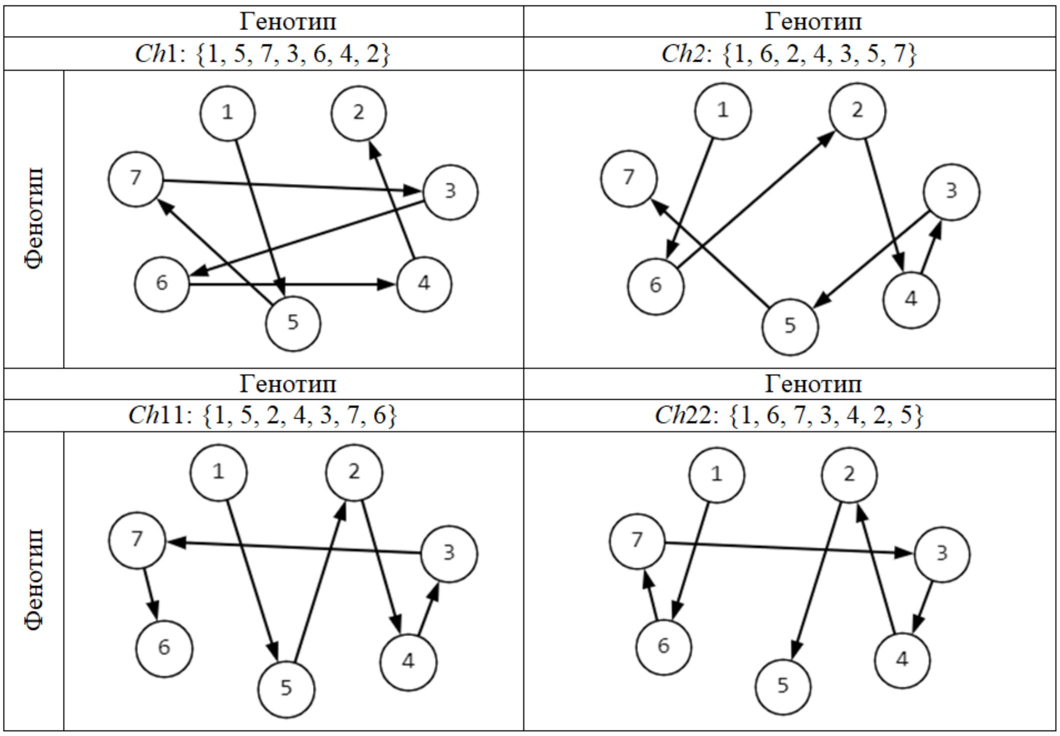


Рисунок 2.2 – Интерпретация хромосом

Таблица 3.1 – Результаты исследованиягенетического алгоритма

Показатели	Исследования *Ii*, *i* = 1,…,4 с разным количеством заказов |*Z*|			
	*I*1: |*Z*| = **5**	*I*2: |*Z*| = **10**	*I*3: |*Z*| = **50**	*I*4: |*Z*| = **100**
Количество поколений, *K*	10	100	100000	1000000
Лучшее решение, C_Z	42	54	269	410
Время поиска, *T* [с]	0,023	0,036	81,21	839,83

Шаг 7. Сортировать все хромосомы в порядке возрастания значений функции приспособленности и удалить из популяции наименее приспособленные хромосомы в количестве, добавленном на шаге 6.

Шаг 8. Повторить шаги 3–7 в соответствии с заданным количеством поколений.

Шаг 9. Определить решение в качестве наилучшего в работе алгоритма, равным хромосоме с наименьшим значением приспособленности.

3 Результаты

На основании матриц P_1–P_4 стоимостей переналадки между уровнями для каждого из параметров, полученных в ходе постановки задачи (таблица 1.1), проведены предварительные исследования генетического алгоритма при различных начальных условиях (размер популяции, количество поколений). Принято решение об исследовании задачи управления порядком выполнения заказов с размером популяции, равным семидесяти хромосомам.

Итоговые результаты исследований представлены в таблице 3.1. В ходе экспериментов решались задачи тестирования программного продукта, оценки погрешности полученной приспособленности, определения времени поиска решения.

В результате исследований экспериментальные данные позволяют провести анализ получения результатов по общей стоимости переналадок оборудования C_Z выполнения заказов, времени (*T*, с) нахождения лучшего решения, приближенного к оптимальному, за количество поколений *K*. Критерием для остановки генетического алгоритма является количество итераций (поколений *K*).

В первом исследовании *I*1 решение получено методом полного перебора (число перестановок равно 120) и с применением генетического алгоритма. Результаты в обоих случаях совпадают, абсолютная погрешность равна нулю. Генетический алгоритм находит оптимальное решение за короткое время, благодаря рациональному заданию количества поколений *K* = 10.

В исследовании *I*2 метод полного перебора не применялся в связи с 3628800 вариантами для поиска оптимального значения. Так же с увеличением числа заказов |*Z*| для поиска лучших решений необходимо увеличивать количество поколений, что в итоге приводит к увеличению вычислительных затрат и, соответственно, увеличению времени поиска лучшего решения.

В исследованиях *I*3 и *I*4 показано, что увеличение числа заказов в два раза с |*Z*| = 50 до |*Z*| = 100 приводит к увеличению времени поиска лучшего решения более чем в десять раз.

Заключение

Полученные результаты работы генетического алгоритма при большом количестве заказов являются приближенными, не являются оптимальными. Однако полученные решения являются рациональными для практического применения.

С ростом масштабируемости задачи возникает необходимость увеличения количества итераций (числа поколений), что приводит к значительному времени работы генетического алгоритма.

Практическая значимость исследований состоит в разработке методики применения генетического алгоритма для решения задачи управления порядком выполнения большого количества заказов при планировании производства.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Терехов*, *М.В*. Повышение эффективности производства на основе разработки автоматизированной системы планирования производства / М.В. Терехов, В.С. Заикин, А.В. Аверченков // Автоматизация и моделирование в проектировании и управлении. – 2021. – № 2 (12). – С. 49–57. – DOI: 10.30987/2658-6436-2021-2-49-57.

2. *Сошников*, *А.В*. Экспресс-метод сокращения потерь времени на переналадки оборудования при смене ассортимента продукции / А.В. Сошников // Национальная ассоциация ученых. – 2020. – № 1 (57). – С. 43–48. – DOI: 10.31618/nas.2413-5291.2020.1.57.261.

3. *Saravanana V*. Lead Time Reduction through Execution of Lean Tool for Productivity Enhancement in Small Scale Industries / V. Saravanana, S. Nallusamyb, K. Balajic // International Journal of Engineering Research in Africa. – 2017. – № 29. – P. 165–174. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/JERA.34.116.

4. *Taillard*, *É.D*. POPMUSIC for the Travelling Salesman Problem / É.D. Taillard, K. Helsgaun // European Journal of Operational Research. – 2019. – № 2 (272). – P. 420–429. – DOI: 10.1016/j.ejor.2018.06.039.

5. *Mele*, *U.J.* New Constructive Heuristic driven by Machine Learning for the Traveling Salesman Problem / U.J. Mele, L.M. Gambardella, R. Montemanni. – A Preprint. – 2021. – 12 p. – Mode of access: https://www.researchgate.net/publication/ 354088626.

6. *Alhanjouri*, *M.A.* Proposed Algorithms to solve Big Data traveling salesman problem / M.A. Alhanjouri // International Journal of Innovative Science, Engineering & Technology. – 2018. – Vol. 5, iss. 6. – P. 14–20. – Mode of access: https:// www.researchgate.net/publication/326325068.

7. *Mariescu-Istodor*, *R.* Solving the Large-Scale TSP Problem in 1 h: Santa Claus Challenge 2020 / R. Mariescu-Istodor, P. Fränti // Frontiers in Robotics and AI. – 2021. – № 8. – P. 1–20. – DOI: 10.3389/frobt.2021.689908.

8. *Gawali*, *M.B.* Task scheduling and resource allocation in cloud computing using a heuristic approach / M.B. Gawali, S.K. Shinde // Journal of Cloud Computing: Advances, Systems and Applications. – 2018. – № 4. – 16 p. – DOI: 10.1186/ s13677-018-0105-8.

Поступила в редакцию 29.11.2023.

Информация об авторах

Демиденко Олег Михайлович – д.т.н., профессор
Якимов Анатолий Иванович – д.т.н., доцент
Борчик Екатерина Михайловна – к.т.н.
Якимов Евгений Анатольевич – к.т.н.
Денисевич Дмитрий Александрович – ст. преподаватель

Проблемы физики, математики и техники, № 1 (58), 2024 **ISSN 2077-8708**

ИНФОРМАТИКА

УДК 681.3.06:624.131 DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_93
EDN: CSOCYZ

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА АДАПТАЦИИ УПРАВЛЕНИЯ С ОБРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ

В.С. Смородин, В.А. Прохоренко

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

INTELLECTUAL ADAPTIVE CONTROL SYSTEM WITH FEEDBACK CONNECTIONS

V.S. Smorodin, V.A. Prokhorenko

Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. Предложен метод адаптации управления на основе многоуровневого сопряжения нейрорегуляторов и имитационных моделей технологических операций для адаптированного управления технологическим циклом с обратными связями по управлению. Изложены принципы создания, разработаны алгоритмы и представлена процедура построения интеллектуальной компьютерной системы адаптации управления нового поколения на основе открытых семантических технологий проектирования интеллектуальных систем (OSTIS).

Ключевые слова: *интегрированная среда OSTIS*, *блок обработки событий*, *база знаний*, *контроллер системы управления*, *модели нейрорегуляторов*, *синтез обратных связей*, *компьютерная система адаптации*.

Для цитирования: *Смородин*, *В.С.* Интеллектуальная система адаптации управления с обратными связями / В.С. Смородин, В.А. Прохоренко // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 1 (58). – С. 93–98. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_93. – EDN: CSOCYZ

Abstract. A method for control adaptation is proposed based on multi-level coupling of neuroregulators and simulation models of technological operations for adaptive control of the technological cycle with control feedback. A new-generation intellectual system based on open semantic technologies for intelligent systems (OSTIS) is described alongside with the principles of its creation, implemented algorithms and construction procedure.

Keywords: *OSTIS integrated environment*, *event processing unit*, *knowledge base*, *control system*, *models of neuroregulators*, *feedback synthesis*, *computer adaptation system.*

For citation: *Smorodin*, *V.S.* Intellectual adaptive control system with feedback connections / V.S. Smorodin, V.A. Prokhorenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2024. – № 1 (58). – P. 93–98. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2024_1_58_93 (in Russian). – EDN: CSOCYZ

Введение

Эффективность функционирования создаваемых автоматизированных систем управления реальными объектами в значительной степени зависит от качества и адекватности математических моделей объекта исследования, которые используются на стадии проектирования системы управления [1]. При этом нелинейность исследуемых процессов и нестационарность характеристик поведения управляемых параметров моделируемых объектов, как и отсутствие достаточно полной информации об условиях изменения текущих параметров в режиме реального времени, затрудняют построение адекватных математических моделей, требуют уточнения параметров состояния автоматизированной системы управления и выполнения динамической корректировки алгоритмов синтеза управляющих воздействий в режиме реального времени [2].

Вместе с тем ориентация технологий моделирования управляемыми производственными системами на способы формализации вероятностных технологических процессов существенно ограничивает возможности решения фундаментальных вопросов, связанных с синтезом оптимальной структуры объектов исследования и стабилизацией параметров функционирования технологических операций (ТО).

Наиболее существенными научными результатами в области исследования функционирования автоматизированных производственных систем и систем управления по этой причине являются разработка эффективных алгоритмов адаптивного управления автоматизированными производствами на основе новых методов нейросетевого моделирования объекта исследования [3].

В рамках предложенного авторами настоящей статьи подхода к многоуровневому моделированию объектов исследования представлен способ построения интеллектуальной системы адаптации управления для автоматизированных производственных систем, при наличии внешних управляющих воздействий и случайных возмущений, с обратными связями по управлению.

1 Проблемы управления технологическими системами с вероятностными параметрами технологических операций

Проблема определения оптимальных параметров управления технологическими системами в режиме реального времени является актуальной задачей управления производством в условиях наличия внешних управляющих воздействий при выполнении технологических операций и случайных возмущений, связанных с конструктивными и надежностными характеристиками функционирования оборудования.

В настоящей работе предлагается решение задачи адаптации управления автоматизированной технологической системой на основе создания интеллектуальной компьютерной системы нового поколения, способной обеспечить стабилизацию параметров технологического цикла при наличии внешних возмущений в режиме реального времени.

Создание интеллектуальной компьютерной системы нового поколения предполагает следующие этапы разработки:

– методики формализации технологического процесса производства на основе использования онтологии предметной области «технологические процессы производства с вероятностными характеристиками»;

– схемы функционирования гибридной интеллектуальной компьютерной системы, обеспечивающей возможность семантической совместимости и совместного использования с другими решениями на промышленных предприятиях в контексте концепции Industry 4.0;

– алгоритмов синтеза обратных связей по управлению на основе применения нейрорегуляторов;

– метода адаптивного управления системами автоматизированного производства при наличии внешних управляющих воздействий.

– программных средств поддержки интеллектуальных систем на базе алгоритмов адаптации и предложенного метода в режиме реального времени.

2 Формализация компонентов интеллектуальной компьютерной системы адаптивного управления

Оптимизация параметров технологического цикла автоматизированного производства требует разработки эффективных алгоритмов адаптации управления и методов построения нейрорегуляторов, стабилизирующих параметры технологических операций с учетом текущей информации о функционировании объекта исследования, случайных возмущениях и внешних управляющих воздействиях, которые фиксируются в процессе работы контроллера системы управления и хранятся на стойке управления автоматизированной системы управления (АСУ) технологическим процессом (ТП).

Структурная блок-схема взаимодействия компонентов интеллектуальной системы адаптации управления представлена на рисунке 2.1. Формальное описание объекта управления проводится на основе использования онтологии предметной области «вероятностные технологические процессы производства». При реализации данного подхода используются формализованные знания для описания технологических процессов с вероятностными характеристиками технологических операций и моделирования технологических процессов.

Применяемая формализация базируется на научных разработках авторов в области имитационного моделирования сложных технических систем и подразумевает использование интегрированных в экосистему OSTIS библиотек агрегатов-имитаторов технологических операций на принципах семантической совместимости [4].

При высокой степени нестационарности характеристик технологических операций объекта управления для построения многоуровневых математических моделей применяются имитационные модели, нейрорегуляторы и многошаговые алгоритмы обучения, обладающие лучшими динамическими свойствами.

Как следует из схемы взаимодействия компонентов системы, формирование обратных связей по управлению сводится к поиску адаптации управления, удовлетворяющей заданным пользователем критериям, осуществляемому по принципу замкнутого контура, в котором на базе собранных статистик функционирования АСУ ТП и коллекции имитационных моделей производится построение моделей нейрорегуляторов. Система принятия решений, функционирующая с использованием построенных нейрорегуляторов, в реальном времени осуществляет формирование корректирующих воздействий на контроллер АСУ ТП.

Внедрение концепции Industry 4.0 на промышленных предприятиях сопровождается созданием цифрового двойника предприятия и построением единой онтологической модели производства, которая является ядром комплексного информационного обслуживания предприятия. Одним из этапов построения модели цифрового двойника предприятия является встраивание данных о низких уровнях производства, таких как технологические процессы производства и оборудование [2].

Для того чтобы обеспечить возможность применения интеллектуальной системы адаптации управления, знания о технологическом процессе предприятия должны быть записаны на формальном языке представления знаний. Источниками таких знаний могут служить существующие описания работы предприятий в рамках принятых международных стандартов (таких как ISA 5.1, ISA-88) [5]. Так, в рамках стандарта ISA-88 технологический цикл называется процедурой (procedure), а технологическая операция – фазой (phase).

При наличии известного состава устройств оборудования и ТО технологического цикла, а также статистических данных об их функционировании, возможно перейти к имитационному моделированию технологического процесса путем замены в вероятностном сетевом графике (ВСГР), описывающем цикл, устройств оборудования на агрегаты-имитаторы функционирования устройств оборудования общего и индивидуального пользования, а сами операции на ИМ ВСГР представить в имитационной модели набором агрегатов-имитаторов событий и агрегатов-имитаторов технологических операций [1]. На базе имитационных моделей технологического цикла, базирующихся на актуальных статистиках функционирования, возможно построение нейрорегуляторов, осуществляющих коррекции управляющих воздействий контроллера.

При таком подходе адаптивной системе управления требуется минимальный объем исходной информации о поступающем сигнале, а описанная формализация дает возможность синтеза баз знаний о промышленном предприятии и его технологических процессах на основе онтологии предметной области в рамках концепции Industry 4.0 автоматизации промышленных предприятий.

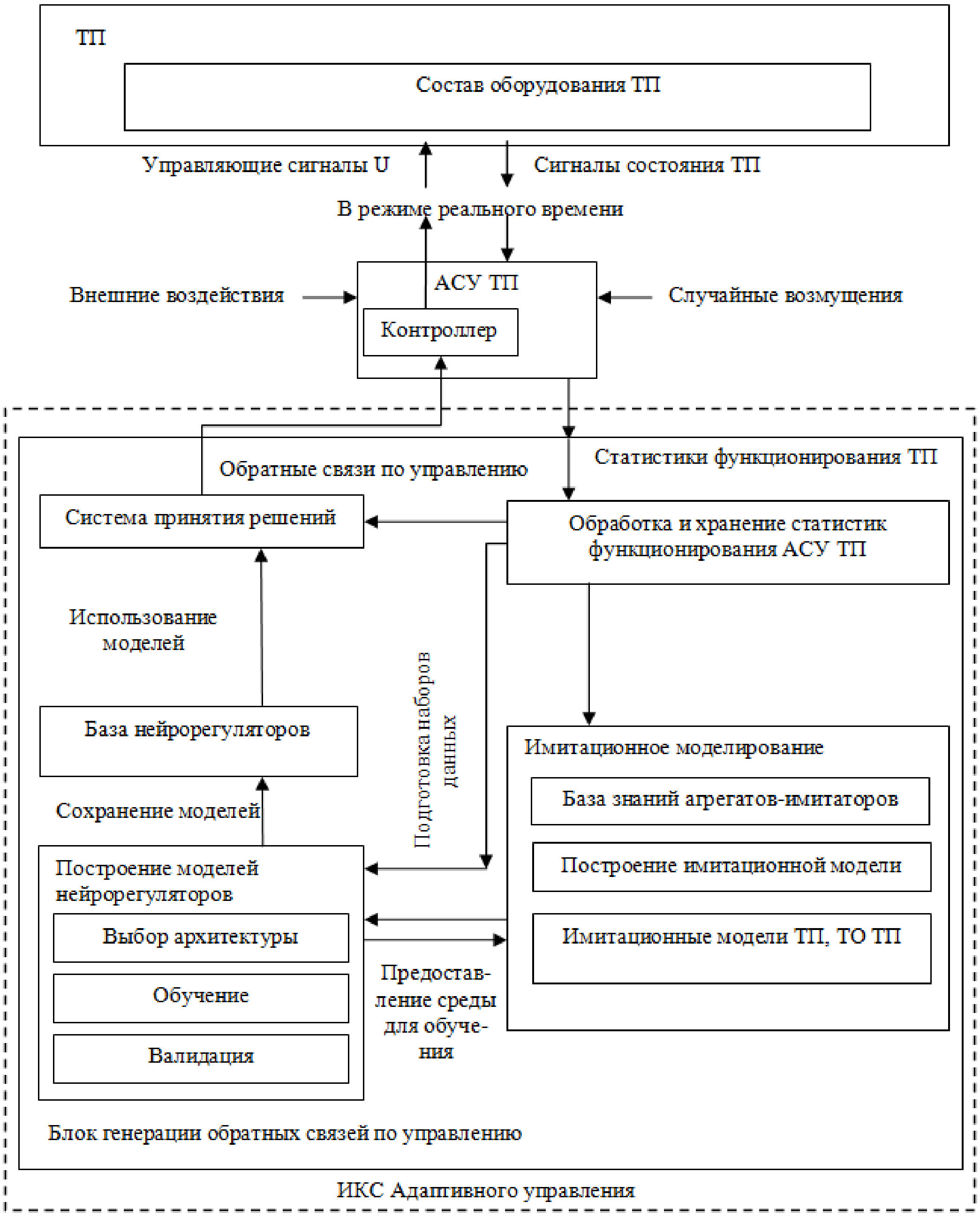


Рисунок 2.1 – Схема взаимодействия компонентов системы адаптивного управления

3 Методика построения гибридной интеллектуальной системы адаптации управления

Основу создания гибридной интеллектуальной системы адаптации управления составляет идея разработки многоуровневых имитационных моделей и математических моделей нейросетевых регуляторов для решения задач оптимизации управления, построения алгоритмов синтеза обратных связей по управлению технологическим циклом в зависимости от изменения параметров функционирования объекта управления.

Гибридная интеллектуальная система адаптации управления включает в себя следующие компоненты: 1) подсистему обработки и хранения статистик функционирования АСУ ТП; 2) подсистему имитационного моделирования; 3) подсистему построения моделей нейрорегуляторов; 4) базу построенных нейрорегуляторов; 5) подсистему принятия решений.

Статистики функционирования ТП включают в себя значения сигналов, описывающих состояние устройств оборудования ТП, а также значения управляющих сигналов. Подсистема обработки и хранения статистик отвечает за сохранение исторических значений данных сигналов.

Подсистема имитационного моделирования позволяет строить и выполнять имитационные модели ТП и его системы управления на основе онтологической модели производства и описанной формализации. В качестве исходных данных используются сохраненные подсистемой обработки и хранения статистик функционирования исторические значения. На их основании строятся функции распределения для ресурсов, потребляемых технологическими операциями и надежностных характеристик оборудования, сохраняемые в базу знаний. Агрегаты-имитаторы функционирования устройств оборудования общего и индивидуального пользования являются основой для создания ИМ ТП.

Подсистема построения моделей нейрорегуляторов реализует алгоритмы нейросетевого моделирования для поиска оптимальной стратегии адаптации управления. При условии наличия известных целевых значений сигналов коррекций (например, в случае ручной разметки данных, либо наличия существующего качественного регулятора контроллера системы), нейрорегулятор может быть построен с использованием собранных статистик функционирования ТП и АСУ [3], [6]. В случае отсутствия прототипа регулятора применяются алгоритмы поиска оптимальной политики выбора действий в среде, построенной на базе подсистемы имитационного моделирования ТП [4]. Осуществляется подбор оптимальной архитектуры нейронной сети и валидация модели после обучения. Модели нейрорегуляторов сохраняются в базу для дальнейшего использования либо дообучения с учетом обновленных статистик.

Подсистема принятия решений осуществляет формирование корректирующих воздействий на контроллер АСУ ТП посредством построенных моделей нейрорегуляторов.

При условии наличия соответствующих средств программно-аппаратного сопряжения, возможна реализация адаптации управления в автоматизированном режиме, либо формирование рекомендательной системы, используемой персоналом, обслуживающим технологический цикл.

Таким образом, при решении задачи стабилизации параметров технологических операций в режиме реального времени использованы многоуровневые математические модели, включая нейросетевые и имитационные, а также реализована гибридная интеллектуальная компьютерная система адаптивного управления нового поколения, созданная на основе открытых семантических технологий проектирования интеллектуальных систем [2].

4 Алгоритмы построения обратных связей по управлению компьютерной системы адаптивного управления

При решении задач адаптации реализованы следующие возможности нейросетевого моделирования для построения обратных связей по управлению: 1) нейросетевое моделирование динамики существующего регулятора; 2) нейросетевой синтез оптимальной стратегии адаптации управления; 3) поиск оптимальной структуры нейронной сети.

Нейросетевое моделирование существующего регулятора эффективно в тех случаях, когда существует качественный регулятор контроллера системы, либо понятны правила его синтеза. Нейронная сеть при этом выступает в роли аппроксиматора его функции и обучается на выборке известных пар данных вида «стимул-реакция» моделировать воздействия нейрорегулятора на АСУ ТП [3]. На рисунке 4.1 показана схема алгоритма построения и валидации подражающего нейрорегулятора.

Нейросетевой синтез оптимальной стратегии адаптации управления осуществляется методами обучения с подкреплением в условиях задания пользователем системы критериев оценки качества политики выбора действий нейрорегулятором, которые применяются для построения целевой функции алгоритма [4]. Алгоритмы такого типа могут содержать в себе элементы исследования пространства решений [7], что делает их применение перспективным в условиях решения трудноформализуемой и неоднозначной задачи выбора оптимальной стратегии адаптации. В качестве среды для обучения и валидации нейрорегуляторов используется имитационная модель ТП. На рисунке 4.2 показаны схема алгоритма построения нейрорегулятора при синтезе оптимальной стратегии адаптации управления.

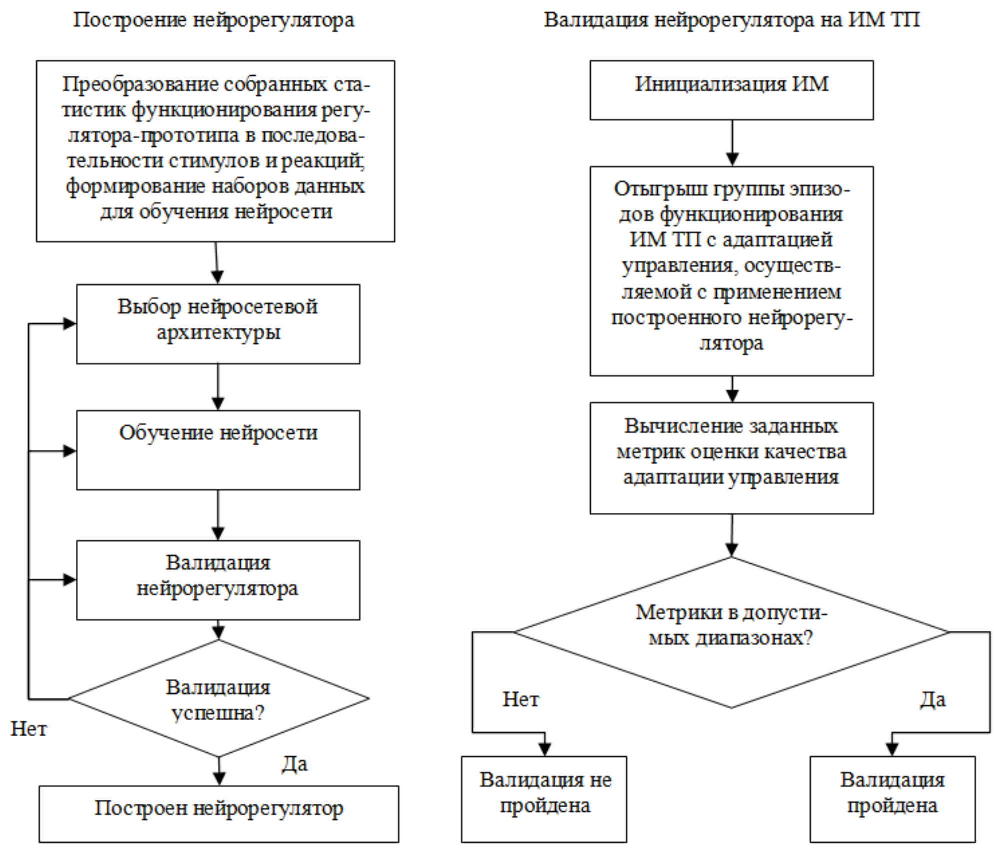


Рисунок 4.1 – Схемы алгоритмов построения (слева) и валидации подражающего нейрорегулятора при моделировании динамики существующего регулятора с использованием ИМ ТП

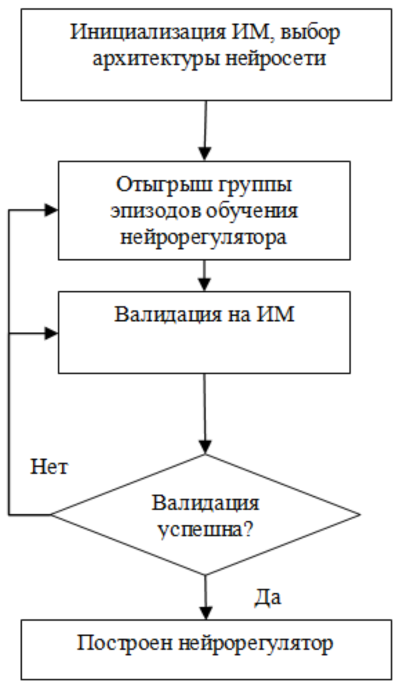


Рисунок 4.2 – Общая схема алгоритма построения нейрорегулятора с использованием обучения с подкреплением

На рисунке 4.3 показан пример использования синтеза оптимальной стратегии адаптации управления ТП в соответствии с выбранным пользователем критерием качества адаптации (снижение затрат).

При решении задач методами нейросетевого моделирования важным вопросом является выбор архитектуры нейронной сети с адекватной сложностью для решения задачи. Реализованы [8] алгоритмы автоматического подбора оптимальной архитектуры нейронной сети с использованием схемы простого перебора и генетического алгоритма на основе алгоритма NEAT [9].

Описанные алгоритмы нейросетевого моделирования позволяют решать задачи адаптации управления и стабилизации параметров функционирования ТП в соответствие с заданными пользователем системы критериями.

Заключение

В работе предложен способ построения интеллектуальной компьютерной системы нового поколения для адаптации управления технологическим циклом автоматизированного производства с обратными связями по управлению при наличии случайных возмущений и внешних управляющих воздействий в интегрированной среде открытых семантических технологий проектирования интеллектуальных систем OSTIS.

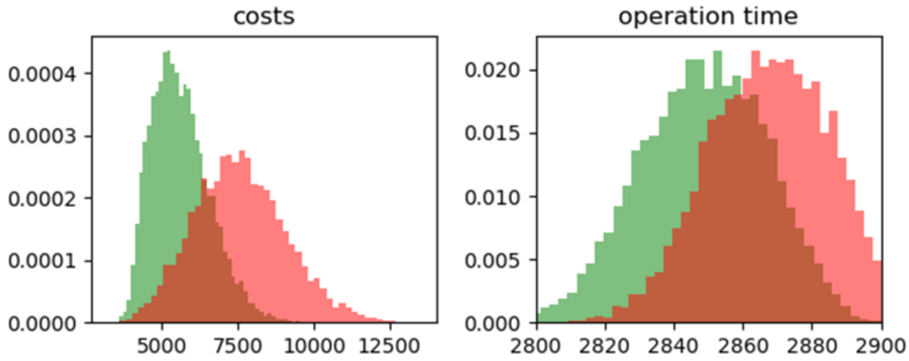


Рисунок 4.3 – Гистограммы распределений параметров ТП
(затрат – слева и времени нормальной работы цикла – справа) при имитации функционирования ТП
с адаптацией управления (зеленый) и без нее (красный).

Обратные связи по управлению формируются на основании поступающей информации о работе оборудования при изменении стандартных параметров физического контроллера автоматизированной системы управления для обработки событий возникновения случайных возмущений и внешних управляющих воздействий в режиме реального времени. Реализованы фундаментальные конструкции метаязыка OSTIS построения базы знаний для формализации вероятностных технологических процессов производства различной архитектуры с изменяющейся топологией.

При решении задачи синтеза оптимальной структуры технологической системы с произвольной организацией технологического процесса производства и стабилизации параметров технологических операций реализованы алгоритмы построения обратных связей по управлению на основе генетических алгоритмов и моделей искусственных нейронных сетей. Адаптация управления осуществляется в рамках решения многокритериальной задачи оценки качества выполнения технологического процесса при минимизации затрат на выполнение замкнутого технологического цикла производства на основе эффективных нейросетевых алгоритмов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Смородин*, *В.С.* Методы и средства имитационного моделирования технологических процессов производства: монография / В.С. Смородин, И.В. Максимей; М-во образования РБ, Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2007. – 369 с.

2. *Автоматизация производственной деятельности в рамках Экосистемы OSTIS* // Технология комплексной поддержки жизненного цикла семантически совместимых интеллектуальных компьютерных систем нового поколения: монография / В.А. Прохоренко [и др.]; под общ. ред. В.В. Голенкова. – Минск, БГУИР 2023. – Гл. 7.7. – С. 805–830.

3. *Smorodin*, *V.* Application of Neuro-Controller Models for Adaptive Control / V. Smorodin, V. Prokhorenko // Recent Developments in Data Science and Intelligent Analysis of Information. ICDSIAI 2018. Advances in Intelligent Systems and Computing; ed. O.Chertov [et al]. – Springer, Cham, 2018. – Vol. 836, iss. 7. – P. 30–38.

4. *Smorodin*, *V.* Software-Technological Complex For Adaptive Control Of A Production Cycle Of Robotic Manufacturing / V. Smorodin, V. Prokhorenko // Open semantic technologies for intelligent systems. – 2022. – iss. 6 – P. 401–404.

5. *Adaptive Control System for Technological Process within OSTIS Ecosystem* / D. Ivaniuk, V. Taberko, V. Smorodin, V. Prokhorenko // Open semantic technologies for intelligent systems. – 2023. – iss. 7. – P. 291–298.

6. *Smorodin*, *V.* Control Of A Technological Cycle Of Production Process Based On A Neuro-Controller Model / V. Smorodin, V. Prokhorenko // Open semantic technologies for intelligent systems – 2019. – iss. 3 – P. 251–256.

7. *Exploration in deep reinforcement learning*: *A survey* / P. Ladosz, L. Weng, M. Kim, H. Oh // Information Fusion. – 2022. – № 85. – P. 1–22.

8. *Никитюк*, *Ю.В.* Многокритериальная оптимизация параметров лазерной резки кварцевого стекла с применением нейросетевого моделирования и генетического алгоритма / Ю.В. Никитюк, В.А. Прохоренко, А.И. Кулыба // Проблемы физики, математики и техники. – 2023. – № 3 (56). – С. 26–31.

9. *Stanley*, *K.O.* Evolving Neural Networks Through Augmenting Topologies / K.O. Stanley, R. Miikkulainen // Evolutionary Computation. – 2002. – Vol. 10 (2). – P. 99–127.

Поступила в редакцию 22.12.2023.

Информация об авторах
Смородин Виктор Сергеевич – д.т.н., профессор
Прохоренко Владислав Александрович – старший преподаватель

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://pfmt.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).