



**САМАРСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

Самарский национальный
исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва



ISSN 2541-7525 Print
ISSN 2712-8954 Online

ВЕСТНИК

САМАРСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНАЯ
СЕРИЯ**

VESTNIK

OF SAMARA UNIVERSITY

**NATURAL SCIENCE
SERIES**

ТОМ 30 • №1 • 2024 ГОД

ISSN 2541-7525 Print
ISSN 2712-8954 Online
Подписной индекс 80307

**ВЕСТНИК
САМАРСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНАЯ СЕРИЯ**

**VESTNIK
OF SAMARA UNIVERSITY
NATURAL SCIENCE SERIES**

- *Математика*
- *Механика*
- *Математическое
моделирование*
- *Физика*

ТОМ 30 • № 1 • 2024 ГОД

УЧРЕДИТЕЛЬ И ИЗДАТЕЛЬ ЖУРНАЛА

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»
(Самарский университет)

eLIBRARY.RU РИНЦ ВИНТИ ULRICH'S Periodical Directory Math-Net.ru zbMATH MathSciNet
Все статьи по тематике международной базы данных zbMATH считаются включенными в Перечень
ведущих научных журналов Высшей аттестационной комиссии при Министерстве образования и науки РФ
Журнал издается с 1995 г. под названием «Вестник Самарского государственного университета»,
с 2016 г. — «Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия / Vestnik of Samara University. Natural
Science Series»

Выходит 4 раза в год Т. 30, № 1, 2024

Главный редактор:

А.Б. Прокофьев, д-р тех. наук, доц., зав. кафедрой теории двигателей летательных аппаратов имени В.П. Лукачева, первый проректор - проректор по научно-исследовательской работе (Самара, Самарский университет, РФ)

Заместители главного редактора:

С.В. Асташкин, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой функционального анализа и теории функций (Самара, Самарский университет, РФ)

Л.В. Степанова, д-р физ.-мат. наук, доц., проф. кафедры математического моделирования в механике (Самара, Самарский университет, РФ)

Ответственный секретарь:

М.А. Лихобабенко, канд. физ.-мат. наук

Лит. редактирование, корректура

Т.И. Кузнецовой

Компьютерная верстка, макет

М.А. Лихобабенко

Выпускающий редактор

Т.А. Мурзинова

Информация на английском языке

М.С. Стрельникова

Издатель и учредитель: Самарский университет

Адрес издателя и учредителя:

443086, Российская Федерация, Самарская обл., г. Самара,
Московское шоссе, 34.

Центр периодических изданий Самарского университета

Адрес редакции: 443011, Российская Федерация,
Самарская обл., г. Самара, ул. Академика Павлова, 1.

E-mail: nvestnik@ssau.ru

www: <http://journals.ssau.ru/index.php/vestnik-est>

Периодическое печатное издание, журнал, зарегистрировано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, регистрационный номер серии ПИ № ФС 77-67328 от 05.10.2016

Подписной индекс в Объединенном интернет-каталоге «Пресса России» 80307

ISSN 2541-7525 Print

ISSN 2712-8954 Online

Авторские статьи не обязательно отражают мнение издателя.

0+

Цена свободная

Подписано в печать 12.04.2024. Дата выхода в свет 15.04.2024

Формат 60 × 84/8.

Бумага офсетная. Печать оперативная.

Печ. л. 16,5.

Тираж 200 экз. (первый завод — 25 экз.). Заказ № 56

Отпечатано в типографии Самарского университета

443086, Российская Федерация, Самарская обл., г. Самара,
Московское шоссе, 34.

www: <http://www.ssau.ru/info/struct/otd/common/edit>

Редакционная коллегия:

В.Н. Аяззов, д-р физ.-мат. наук, директор (Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, Самара, РФ), профессор кафедры физики (Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, РФ)

В.Э. Видельман, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой экспериментальной механики и конструкционного материаловедения, директор Центра экспериментальной механики (Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, РФ)

А.В. Горохов, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. кафедры общей и теоретической физики (Самарский университет, Самара, РФ)

А.М. Зюзин, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой экспериментальной физики (Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, РФ)

В.В. Ивазник, д-р физ.-мат. наук, проф., декан физического факультета, зав. кафедрой оптики и спектроскопии (Самарский университет, Самара, РФ)

А.И. Кожанов, д-р физ.-мат. наук, проф., ведущий научный сотрудник лаборатории теории функций (Институт математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, РФ)

М.А. Леган, д-р тех. наук, доц., проф. кафедры прочности летательных аппаратов (Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, РФ)

С.А. Лычев, д-р физ.-мат. наук, доц., ведущий научный сотрудник лаборатории Механики технологических процессов (Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, РФ)

Константин Панкрашикин, д-р физ.-мат. наук, проф. кафедры математики (Университет Париж-юг 11, Орсе, Франция)

А.Н. Панов, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой алгебры и геометрии (Самарский университет, Самара, РФ)

Давиде М. Прозертио, д-р химии, проф. кафедры химии (Миланский университет, Милан, Италия)

Л.С. Пульжина, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. кафедры дифференциальных уравнений и теории управления (Самарский университет, Самара, РФ)

С.Г. Пятков, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой высшей математики; ведущий научный сотрудник (Югорский государственный университет, Ханты-Мансийск, РФ; Институт математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, РФ)

В.В. Ревин, д-р биол. наук, проф., декан факультета биотехнологии и биологии, зав. кафедрой биотехнологии, биоинженерии и биохимии (Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, РФ)

В.А. Салеев, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. кафедры физики (Самарский университет, Самара, РФ)

В.А. Соболев, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой дифференциальных уравнений и теории управления, профессор кафедры кибернетики (Самарский университет, Самара, РФ)

П.А. Терехин, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. кафедры теории функций и стохастического анализа (Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, РФ)

К.Б. Устинов, д-р физ.-мат. наук, доц., ведущий научный сотрудник лаборатории Геомеханики (Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, РФ)

А.И. Хромов, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. кафедры прикладной математики и информатики (Комсомольский-на-Амуре государственный университет, Комсомольск-на-Амуре, РФ)

© Самарский университет, 2024

ISSN 2541-7525 Print
ISSN 2712-8954 Online
Subscription Index 80307

**VESTNIK
SAMARSKOGO UNIVERSITETA
ESTESTVENNONAUCHNAYA SERIYA**

**VESTNIK
OF SAMARA UNIVERSITY
NATURAL SCIENCE SERIES**

- *Mathematics*
- *Mechanics*
- *Mathematical
Modelling*
- *Physics*

VOL. 30 • № 1 • 2024

JOURNAL FOUNDER AND PUBLISHER
Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education
«Samara National Research University»
(Samara University)

eLIBRARY.RU RSCI VINITI ULRICH'S Periodical Directory Math-Net.ru zbMATH MathSciNet
All articles on the subject of an international database zbMATH seemed to be included in the list of leading scientific journals of the Higher Attestation Committee at the Ministry of Education and Science of the Russian Federation

The journal is published since 1995 under the title Vestnik of Samara State University, since 2016 —
"Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya Seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series"
It is published 4 times a year V. 30, № 1, 2024

Chief editor:

A.B. Prokofiev, Dr. of Engineering Sci., associate professor, head of the Department of Theory of Aircraft Engines named after V.P. Lukacheva, first vice-rector II vice-rector for research (Samara, Samara National Research University, RF)

Deputy chief editors:

S.V. Astashkin, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., head of the Department of Functional Analysis and Function Theory (Samara, Samara National Research University, RF)

L.V. Stepanova, Dr. of Phys.-Math. Sci., associate prof., prof. of the Department of Mathematical Modelling in Mechanics (Samara, Samara National Research University, RF)

Executive editor:

M.A. Likhobabenko, Cand. of Phys.-Math. Sci.

Literary editing, proofreading

T.I. Kuznetsova

Computer makeup, dummy

M.A. Likhobabenko

Executive editor

T.A. Murzinova

Information in English

M.S. Strelnikov

Publisher and Founder: Samara National Research University

Adress publisher and founder:

34, Moskovskoye shosse,

Samara, 443086, Samara region, Russian Federation.

Centre of Periodical Publications of Samara University

Adress of editorial stuff: 1, Akademika Pavlova Street, Samara, 443011, Samara region, Russian Federation.

E-mail: nsvestnik@ssau.ru

www: <http://journals.ssau.ru/index.php/vestnik-est>

Certificate of registration of means of mass media ПИ № ФС 77-67328 dated 05.10.2016, issued by the Federal Service for Supervision of Communications, Information Technology and Mass Media.

Subscription Index in the United catalog of Internet «Press of Russia» 80307

ISSN 2541-7525 Print

ISSN 2712-8954 Online

Author's articles do not necessarily reflect the views of the publisher.

0+

Price free

Passed for printing 12.04.2024.

Format 60 × 84/8.

Litho paper. Instant print.

Print. sheets 16,5.

Circulation 200 copies (first printing – 25 copies).

Order № 56

Printed on the printing house of Samara University

34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Samara region, Russian Federation

www: <http://www.ssau.ru/info/struct/otd/common/edit>

Editorial board:

V.N. Azyazov, Dr. of Phys.-Math. Sci., head (Samara Branch of the Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Samara, Russia), prof. of the Department of Physics (Samara National Research University, Samara, RF)

V.E. Videlman, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., head of the Department of Experimental Mechanics and Engineering Materials Science, head of the Center of Experimental Mechanics (Perm National Research Polytechnic University, Perm, RF)

A.V. Gorokhov, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., prof. of the Department of General and Theoretical Physics (Samara National Research University, Samara, RF)

A.M. Zyuzin, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., head of the Department of Experimental Physics (Ogarev Mordovia National University, Saransk, RF)

V.V. Ivakhnik, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., dean of the Faculty of Physics, head of the Department of Optics and Spectroscopy (Samara National Research University, Samara, RF)

A.I. Kozhanov, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., leading research worker of the Laboratory of the Theory of Functions (Sobolev Institute of Mathematics of the Siberian branch of the RAS, Novosibirsk, RF)

M.A. Legan, Dr. of Engineering Sci., associate prof., prof. of the Department of Strength of Flying Machines (Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, RF)

S.A. Lychev, Dr. of Phys.-Math. Sci., associate professor, leading research worker at the Laboratory of Mechanics of Technological Processes (Institute for Problems in Mechanics of Russian Academy of Science, Moscow, RF)

Konstantin Pankrashkin, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof. of the Department of Mathematics (University of Paris-Sud 11, Orsay, France)

A.N. Panov, Dr. of Phys.-Math. Sci., professor, head of the Department of Algebra and Geometry (Samara National Research University, Samara, RF)

Davide M. Proserpio, Dr. of Chemistry, prof. of the Department of Chemistry (University of Milan, Milan, Italy)

L.S. Pulkina, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., prof. of the Department of Differential Equations and Control Theory (Samara National University, Samara, RF)

S.G. Pyatkov, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., head of the Department of Higher Mathematics; leading research worker (Yugra State University, Khanty-Mansiysk, RF; Sobolev Institute of Mathematics of the Siberian branch of the RAS, Novosibirsk, RF)

V.V. Revin, Dr. Degree in Biology, prof., dean of the Faculty of Biotechnology and Biology, head of the Department of Biotechnology, Bioengineering and Biochemistry (Ogarev Mordovia National Research University, Saransk, RF)

V.A. Saleev, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., prof. of the Department of Physics (Samara National Research University, Samara, RF)

V.A. Sobolev, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., head of the Department of Differential Equations and Control Theory, prof. of the Department of Engineering Cybernetics (Samara National Research University, Samara, RF)

P.A. Terekhin, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., prof. of the Department of Function Theory and Stochastic Analysis (Saratov State University, Saratov, RF)

K.B. Ustinov, Dr. of Phys.-Math. Sci., associate professor, leading research worker at the Laboratory of Geomechanics (Institute for Problems in Mechanics of Russian Academy of Science, Moscow, RF)

A.I. Khromov, Dr. of Phys.-Math. Sci., prof., prof. of the Department of Applied Mathematics and Informatics (Komsomolsk-na-Amure State University, Komsomolsk-on-Amur, RF)

© Samara University, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Степанова Л.В., Осипов М.Н., Федина М.Е., Воропаева Н.В., Крутов А.Н.,
Бондаренко В.В. Памяти Владимира Ивановича Астафьева (30.11.1948–08.02.2024) 7

Математика

Гусейнов С.Т., Алиев М.Дж. Некоторые вспомогательные оценки решений для неравномерно
вырождающихся эллиптических уравнений второго порядка 23
Кирсанова А.С. Релаксационные колебания в модели ветроэнергетической установки Дарье 31

Механика

Litvinov V.L., Litvinova K.V. On one solution of the vibration problem of mechanical systems
with moving boundaries 40
Устинов К.Б., Гандилян Д.В. О граничных условиях для тонкой круглой пластины, сопря-
женной с массивным телом 50

Математическое моделирование

Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Рахманкулов И.Р., Чипура А.С.
Моделирование полупроводниковых гетероструктур для преобразователей энергии и датчиков 64

Физика

Багров А.Р., Башкиров Е.К. Динамика перепутанных состояний Гринбергера — Хорна —
Цайлингера в трехкубитной тепловой модели Тависа — Каммингса 82
Карпишков А.В., Салеев В.А., Шиляев К.К. Рождение поляризованных J/ψ на коллайдере
NICA в НРКХД и обобщенной партонной модели 96
Осман А., Башкиров Е.К. Динамика атом-атомного перепутывания в двухатомной модели
с вырожденными двухфотонными переходами рамановского типа 112
Чернышёв Д.Н., Клочкова В.С., Лелеков А.С. Модель декомпозиции нативного спектра
поглощения культуры *Porphyridium purpureum* 122

Требования к оформлению статей 132

CONTENTS

Stepanova L.V., Osipov M.N., Fedina M.E., Voropaeva N.V., Krutov A.N., Bondarenko V.V. In memory of Vladimir Ivanovich Astafyev (30.11.1948–08.02.2024)	7
--	---

Mathematics

Huseynov S.T., Aliyev M.J. Some auxiliary estimates for solutions to non-uniformly degenerate second-order elliptic equations	23
Kirsanova A.S. Relaxation oscillations in the Darie wind power plant model	31

Mechanics

Litvinov V.L., Litvinova K.V. On one solution of the vibration problem of mechanical systems with moving boundaries	40
Ustinov K.B., Gandilyan D.V. On the boundary conditions for a thin circular plate conjugated to a massive body	50

Mathematical Modelling

Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Rakhmankulov I.R., Chipura A.S. Modeling of semiconductor heterostructures for energy converters and sensors	64
--	----

Physics

Bagrov A.R., Bashkirov E.K. Dynamics of entangled Greenberger — Horne — Zeilinger states in three qubits thermal Tavis — Cummings model	82
Karpishkov A.V., Saleev V.A., Shilyaev K.K. Prompt polarized J/ψ production at NICA within NRQCD and generalized parton model	96
Othman A., Bashkirov E.K. Dynamics of atom-atom entanglement in two-atom model with degenerate two-photon raman transitions	112
Chernyshev D.N., Klochkova V.S., Lelekov A.S. Model of decomposition of the native absorption spectrum of <i>Porphyridium purpureum</i> culture	122
<i>Requirements to the design of articles</i>	132



Редакционная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-7-22

УДК 512.531; 519.7

Дата: поступления статьи: 15.02.2024
после рецензирования: 20.02.2024
принятия статьи: 28.02.2024

Л.В. Степанова

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: stepanova.lv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6693-3132>

М.Н. Осипов

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: osipov.mn@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8104-5002>

М.Е. Федина

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: phedina.me@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8899-1926>

Н.В. Воропаева

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: voropaeva.nv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0003-7242-4590>

А.Н. Крутов

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: krutov.an@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-5196-3586>

В.В. Бондаренко

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: bondarenko.vv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-2306-2017>

ПАМЯТИ ВЛАДИМИРА ИВАНОВИЧА АСТАФЬЕВА (30.11.1948–08.02.2024)

АННОТАЦИЯ

Статья посвящена памяти доктора физико-математических наук, профессора, заслуженного деятеля науки РФ Владимира Ивановича Астафьева, профессиональная деятельность которого более 35 лет связана с Самарским университетом. Научная, педагогическая и организаторская деятельность В.И. Астафьева во многом определяла и будет определять образовательную деятельность и научные направления, развиваемые на механико-математическом факультете. Его безграничная преданность университету, широкое и глубокое образование, высокая математическая культура позволили В.И. Астафьеву воспитать целую плеяду ученых и профессоров, работающих сейчас в университете.

Цитирование. Степанова Л.В., Осипов М.Н., Федина М.Е., Воропаева Н.В., Крутов А.Н., Бондаренко В.В. Памяти Владимира Ивановича Астафьева (30.11.1948 – 08.02.2024) // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 7–22. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-7-22>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Степанова Л.В., Осипов М.Н., Федина М.Е., Воропаева Н.В., Крутов А.Н., 2024

Лариса Валентиновна Степанова — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой математического моделирования в механике, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Михаил Николаевич Осипов — кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой безопасности информационных систем, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Мария Ефимовна Федина — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры безопасности информационных систем, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Наталья Владимировна Воропаева — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры дифференциальных уравнений и теории управления, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Алексей Николаевич Крутов — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры безопасности информационных систем, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Владимир Владимирович Бондаренко — доцент кафедры безопасности информационных систем, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.



Астафьев Владимир Иванович родился 30 ноября 1948 года в поселке Важская Запань Вельского района Архангельской области. После окончания школы решил поступить в МГУ имени М.В. Ломоносова на физический факультет. Но в поступлении было отказано из-за плохого зрения, поэтому подал документы на механико-математический. В 1966 году поступил и в 1972

году закончил механико-математический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, в 1975 году поступил в аспирантуру того же факультета по кафедре теории пластичности отделения механики. С 1975 по 2010 гг. работал в Куйбышевском (затем Самарском) государственном университете: ассистентом, старшим преподавателем, доцентом, заведующим кафедрой, проректором по научной работе, деканом. Ученая степень кандидата физико-математических наук присуждена в 1977 году, тема кандидатской диссертации «Применение смешанной формы метода конечных элементов к расчету на изгиб перфорированных пластин с учетом физической нелинейности», научный руководитель — проф. С.А. Шестериков. Ученое звание доцента присвоено в 1982 году. В 1987 году защитил диссертацию «Разрушение металлов в условиях ползучести» на соискание степени доктора физико-математических наук. В период 1987–2002 гг. — профессор и заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела, с 1994 по 2000 гг. — проректор по научной работе Самарского государственного университета. С 2000 г. по 2010 г. Владимир Иванович являлся деканом механико-математического факультета. В период 2002–2010 гг. — профессор и заведующий кафедрой безопасности информационных систем СамГУ. Имеет почетное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации». С 2010 по 2023 гг. — профессор кафедры разработки и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений Самарского государственного технического университета и профессор кафедры сопротивления материалов Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева.



Рис. 1. Владимир Астафьев. 1967 г.

Fig. 1. Vladimir Astafyev. 1967

Область научных интересов: механика неупругого деформирования (пластичность, ползучесть), механика накопления поврежденности и разрушения, подземная гидромеханика, задачи фильтрации нелинейной жидкости.

Научная деятельность: член международного научного общества ESIS (European Structural Integrity Society), член международного научного общества EUROMECH (European Mechanics Society),



Рис. 2. В строительном отряде, 1967 г.
Fig. 2. In the construction brigade, 1967



Рис. 3. Красноярск, 1969 г.
Fig. 3. Krasnoyarsk, 1969

член международного научного общества EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers), имеет более 200 публикаций, в т. ч. 4 монографии, 10 учебно-методических пособий, 2 авторских свидетельства.

За этими скупыми сведениями стоят жизнь и судьба человека и ученого, неразрывно связанного с Куйбышевским государственным, а потом Самарским государственным университетом на протяжении 35 лет. Сам Владимир Иванович Астафьев называл этот период жизни самарским, когда он, выпускник аспирантуры Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, по приглашению д.ф.-м.н., проф., ректора Куйбышевского государственного университета (1973–1977 гг.) С.И. Мешкова пришел на кафедру механики деформируемого твердого тела. С 1 декабря 1975 года начинается научная, педагогическая и общественная деятельность В.И. Астафьева сначала в Куйбышевском государственном университете, а потом, после переименования города, в Самарском государственном университете, в котором он прошел весь путь от ассистента кафедры до проректора по научно-исследовательской работе университета. В 1977 году В.И. Астафьев защищает диссертацию на соискание степени кандидата физико-математических наук по теме «Применение смешанной формы метода конечных элементов к расчету на изгиб перфорированных пластин с учетом физической нелинейности». Следует обратить внимание на применение метода конечных элементов в диссертации уже далекого от нас 1977 года, а кандидатская диссертация готовилась в период 1972–1975 гг., когда только зарождались современные расчетные комплексы, реализующие метод конечного элемента, ставший распространенным рабочим инструментом моделирования в механике только два десятилетия спустя. Более того, диссертационное исследование было посвящено изучению изгиба перфорированных пластин с учетом физической нелинейности, что представляет собой актуальную задачу и в настоящее время, поскольку сложные нелинейные определяющие соотношения, описывающие поведение деформируемых твердых тел, поныне являются предметом интенсивного научного поиска.

В это же время регистрируются два авторских свидетельства, остающихся современными в наши дни: 1) авторское свидетельство № 446084 А1 СССР, МПК G06J 3/00. Преобразователь дискретной и аналоговой информации в световой поток: № 1893235/18-24: заявл. 13.03.1973: опубл. 05.10.1974 / В.И. Астафьев, И.П. Гамкрелидзе, П.Я. Даниленко, Э.С. Тодрия и 2) авторское свидетельство № 489041 А1 СССР, МПК G01P 21/00. Устройство для тарировки приборов приемника воздушного давления на мерной базе: № 2037754: заявл. 05.05.1974: опубл. 25.10.1975 / В.И. Астафьев, В.Я. Декуш.

С 1978 по 1987 гг. В.И. Астафьев работает над своей докторской диссертацией, открывая тем самым новое научное направление, нацеленное на математическое моделирование и анализ процессов роста трещины в условиях ползучести. Анализ влияния процесса накопления повреждений у вершины трещины и сейчас является одним из основных направлений научных исследований кафедры математического моделирования в механике Самарского университета. Данное направление является развитием и обобщением идей, предложенных школой академика Ю.Н. Работнова и член-корр. С.А. Шестерикова в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова. Основное внимание уделяется анализу зоны у вершины трещины, в которой возникают пластические деформации и деформации ползучести с позиций механики поврежденности. Подробно исследованы критерии разрушения при ползучести. Сформулирован диссипативный критерий разрушения для металлов, проявляющих механизм хрупкого разрушения при ползучести, предложена методика определения критериальных параметров, представлены их значения и кривые ползучести для ряда металлов. С 1978 по 2005 гг. В.И. Астафьев со своими учениками предложил математические модели для нестационарного поля напряжений у вершины трещины в условиях ползучести с привлечением параметра поврежденности материала с учетом перераспределения напряжений от исходного упругого состояния до режима установившейся ползучести. В.И. Астафьевым в 1986 году предложен тензорный параметр поврежденности, связанный с изменением площади элементарной площадки в процессе роста дефектов. В.И. Астафьев показал, что использование тензорной меры поврежденности позволяет качественно правильно описать процесс развития поврежденности в теле, а именно процесс развития пор и их слияние, образование микротрещины, расположенной на площадках, ортогональных направлению максимального главного напряжения. В.И. Астафьевым установлены важные закономерности подрастания трещин в режиме ползучести. Руководствуясь энергетическим критерием разрушения, он установил, что «эффективная» энергия формоизменения с учетом накопления поврежденности в момент разрушения принимает свое предельное значение. Им описаны неустойчивый рост трещины при достижении S^* -интегралом своего критического значения, неподвижность трещины в течение некоторого времени с последующим переходом либо к процессу неустойчивого роста, либо к стадии медленного докритического подрастания вплоть до достижения трещиной ее критической длины, мгновенное подрастание трещины при увеличении нагрузки и ее остановка на некоторое время после уменьшения нагрузки.

Большой цикл работ и исследования, выполненные в данное время, завершились написанием докторской диссертации, перечисление официальных оппонентов которой вызывает восхищение. Официальными оппонентами диссертации на соискание степени доктора физико-математических наук В.И. Астафьева были д.ф.-м.н. Г.П. Черепанов, д.ф.-м.н. О.В. Соснин и д.ф.-м.н. Д.Д. Ивлев. Дюис Данилович Ивлев — выдающийся советский и российский ученый в области механики деформируемого твердого тела, доктор физико-математических наук, заслуженный деятель науки Российской Федерации, работы которого в теории пластичности стали фундаментальным вкладом в механику деформируемого твердого тела. Олег Васильевич Соснин — российский механик, доктор физико-математических наук, заслуженный деятель науки Российской Федерации, которым разработаны и экспериментально обоснованы математическая теория ползучести и ее приложения. Геннадий Петрович Черепанов — советский и американский ученый, занимавшийся вопросами механики разрушения, доктор физико-математических наук, профессор, почетный академик Нью-Йоркской Академии наук, почетный член Международного конгресса по разрушению, автор более чем трехсот работ по механике разрушения, прикладной математики и физики, механики и физики твердого тела. В честь Г.П. Черепанова назван инвариантный (не зависящий от пути) интеграл Эшелби — Черепанова — Райса, известный как J-интеграл и G-интеграл.

По воспоминаниям самого В.И. Астафьева, ему запомнилось участие в работе II Всесоюзной конференции «Ползучесть в конструкциях» (Новосибирск, 1984 г.), где впервые из уст Ю.В. Немировского прозвучало, что работу можно представлять как докторскую. Юрий Владимирович Немировский — доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории «Физика быстропотекающих процессов» Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христановича Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск; профессор кафедры «Прочность летательных аппаратов» Новосибирского государственного технического университета (НГТУ). Знаковым для В.И. Астафьева стало участие в работе VI Всесоюзного съезда по теоретической и прикладной механике (Ташкент, 1986 г.), где определился один из оппонентов — Г.П. Черепанов, и представление диссертации к защите в Новосибирске (1987), а именно доклад на семинаре в Институте горного дела СО АН СССР (рук. семинара — д.ф.-м.н. Е.И. Шемякин), на семинаре в ИТПМ СО АН СССР (Ю.В. Немировский) и на семинаре в ИГ СО АН СССР (О.В. Соснин). В итоге работа была принята к защите и (с некоторыми проблемами) единогласно защищена. В день защиты официальный оппонент О.В. Соснин был госпитализирован из-за проблемы с сердцем и пришлось ехать в кардиологию и упрашивать главврача отпустить Олега Васильевича хотя бы на час, чтобы в явочном листе были отмечены его явка как члена совета и его выступление как оппонента. После защиты докторской диссертации В.И. Астафьев с 1988 по 1993 гг. работает заведующим кафедрой механики деформируемого твердого тела и активно продолжает исследования в области взаимного воздействия поля повреждений и эволюции напряженно-деформированного состояния вблизи вершины трещины в режиме установившейся ползучести.

Совместно с В.А. Пастуховым проведен критический анализ как экспериментальных, так и теоретических данных о скорости роста трещины предкритической ползучести, который позволяет описать процесс. Представлена модель трещины отрыва (трещины типа I) в упругом нелинейно-вязком материале, основанная на применении скалярного параметра повреждения, имеющего соответствующие кинетические уравнения. Предполагалось, что длина трещины непрерывно растет из-за того, что параметр поврежденности (сплошности) достигает своей критической величины в зоне предварительного разрушения вблизи вершины трещины. Поле напряжений вблизи вершины трещины характеризуется асимптотикой установившейся ползучести, в то время как в областях за пределами этой области используется асимптотика упругого решения. Также совместно с В.А. Пастуховым представлена модель, позволяющая описать широкий спектр явлений, связанных с ростом трещины в режиме ползучести, которые наблюдались экспериментально. Впервые была получена двухпараметрическая зависимость для скорости роста трещины в условиях ползучести и описано изменение управляющего параметра. Представлен структурный параметр, характеризующий способность материала противостоять развитию крупных трещин в условиях высокотемпературной ползучести. В.И. Астафьевым совместно с Т.В. Григоровой и В.А. Пастуховым определены асимптотические поля напряжений и повреждений вблизи вершины растущей трещины в материале, поврежденном ползучестью, с помощью определяющего уравнения Работнова — Хейхерста — Леки. Было показано, что вблизи вершины растущей трещины суммарное напряжение σ/ψ ограничено, напряжение σ и сплошность ψ падают до нуля у вершины трещины. Асимптотические поля напряжений и повреждений полностью определяются текущей скоростью роста трещины, не зависимым от траектории интегралом теории стационарной ползучести, константами материала ползучести и повреждения. Реальную скорость роста трещины можно оценить, сравнив поля вблизи и на удалении от вершины трещины. Количественно выведенный механизм роста трещин объясняет особенности процесса в нержавеющей стали.

Полученные решения данного класса стали основой диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук В.А. Пастухова «Модель роста трещины в условиях ползучести» (1987 г.). Впоследствии были рассмотрены задачи отыскания асимптотического решения вблизи вершины трещины в среде с поврежденностью. Решение задачи моделирования роста трещины антиплоского (продольного) сдвига в связанной постановке (когда параметр поврежденности входит в конституционные уравнения) для случая ползучести с учетом накопления повреждений позволяет сформулировать следующие выводы. Во-первых, в близлежащей окрестности дефекта не формируется классическое поле напряжений, обладающее сингулярностью, типичное для теории трещин, в ближайшей окрестности вершины трещины: эквивалентные напряжения σ/ψ в непосредственной близости вершины трещины являются ограниченными функциями, в то время как сами компоненты напряжений σ_{ij} и функция сплошности ψ по линейному закону убывают до нуля у вершины трещины, что полностью согласуется с результатами, полученными посредством конечно-элементного анализа для трещин отрыва. Во-вторых, продемонстрировано, что свободные от поверхностных усилий берега трещины ($\varphi = \pm\pi$) примыкают вблизи вершины трещины к области полностью разрушенного (поврежденного) материала ($\pi/2 < \varphi < \pi$), в которой выполняются равенства $\sigma_{ij} = 0$ и $\psi = 0$ (т. е. материал не несет нагрузки). В-третьих, искомая скорость роста трещины в связанной формулировке задачи является ее внутренним параметром и находится в ходе решения задачи. Результирующий закон роста трещин качественно отражает особенности этого процесса в коррозионно-стойких сталях при постоянной нагрузке. Наконец, в-четвертых, в результате связанной постановки задачи сингулярность вершины трещины исчезает, и это приводит к относительно более низким значениям скорости роста трещины. Именно полученные результаты дали возможность В.И. Астафьеву и коллективу кафедры механики деформируемого твердого тела выиграть гранты Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-01-17652 «Механика разрушения при влиянии различных сред с учетом эффектов накопления поврежденности»). В работе В.И. Астафьева и Т.В. Григоровой «Распределение напряжений и поврежденности у вершины растущей в процессе ползучести трещины» (Астафьев В.И., Григорова Т.В. // Известия РАН. Механика твердого тела. 1995. № 3. С. 160–166) показано, что берега движущейся в процессе установившейся ползучести трещины охвачены зоной полностью поврежденного материала, в которой все компоненты тензора напряжений и сплошность обращаются в нуль. Полученное не обладающее сингулярностью поле напряжений существенным образом разнится с аналогичным (сингулярным) представлением поля напряжений в несвязанной формулировке задачи (в рамках которой избранное эволюционное уравнение, описывающее процесс накопления повреждений, интегрируется после определения напряженно-деформированного состояния и, следовательно, изменение функции сплошности не оказывает влияния на радиальное поведение полей напряжений и деформаций, оставляя данные поля сингулярными в близлежащей окрестности вершины дефекта) и является результатом влияния процесса накопления поврежденности на ползучесть материала. Формирование области полностью поврежденного (разрушенного) материала вблизи поверхности медленно (докритически) растущей трещины может быть объяснено микроветвлением и микрорастрескиванием, при котором вдоль всей траектории развития макроскопической трещины образуются ортогонально ориентированные к ней микротрещины. Работа была выполнена при поддержке Министерства науки, высшей школы и технической политики (проект 2-41-8-27). Следует отметить, что гипотеза о существовании области полностью поврежденного материала впоследствии была использована многими механиками, занимающимися вопросами накопления повреждений у вершины трещины. Однако впервые данная терминология и сама область полностью поврежденного материала были введены В.И. Астафьевым в 1991 году, намного ранее других авторов: Astafyev, V.I., Grigorova, T.V., Pastukhov, V.A., 1991. Influence of continuum damage on stress distribution near a tip of a growing crack under creep conditions. In: Cocks, A.C.F., Ponter, A.R.S. (Eds.), Mechanics of Creep and Brittle Materials, vol. 2. Elsevier, London, pp. 49–61.

Параллельно с пионерскими исследованиями поля напряжений у вершины трещины в поврежденной среде в условиях ползучести у В.И. Астафьева формируется интерес к проблеме сульфидного растрескивания под напряжением (КРН). Им совместно с С.В. Артамошкиным и Т.В. Тетюевой была проведена оценка стойкости некоторых низколегированных трубчатых сталей к сульфидному коррозионному растрескиванию под напряжением. Было исследовано влияние микроструктуры и неметаллических включений на восприимчивость к коррозионному растрескиванию. Были использованы три группы по-разному термообработанных низколегированных сталей с различной микроструктурой и формой неметаллических включений. Были определены пороговые значения. Для анализа конкретных микроструктурных механизмов накопления повреждений в процессах КРН были использованы фрактографический и металлографический методы. Интерес к процессам развития трещины в охрупчивающейся упругопластической среде привел к циклу совместных работ с Л.К. Ширяевой, связавшей свою профессиональную деятельность с Самарским университетом и успешно работающей

в настоящее время в Самарском университете в Институте информатики и кибернетики. В работе предложена математическая модель растущей трещины в охрупчивающейся упругопластической среде. Моделирование проведено с привлечением внутренней скалярной переменной (параметра сплошности или поврежденности). Предполагалось, что область, в которой накапливается водород и идут процессы охрупчивания, является отрезком, лежащим на продолжении трещины, таким образом, использовалась модель Леонова — Панасюка — Дайгдейла. Разработанная модель была применена к задаче о росте полубесконечной трещины в среде, охрупчивающейся под воздействием водородсодержащей среды. Результаты моделирования охрупчивания в процессе воздействия водородсодержащей среды были поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований, проект 96-01-01064 «Накопление поврежденности и разрушение металлов в условиях коррозионного растрескивания под напряжением». В рамках данного проекта РФФИ сформулирована и развита целая серия математических моделей и методов, позволяющих описать явление накопления повреждений в идеально пластических материалах, охрупчивающихся при КРН. Процесс накопления повреждений в условиях КРН изучается путем введения внутренней скалярной переменной состояния (посредством параметра поврежденности) и формулируется соответствующее кинетическое уравнение накопления повреждений, описывающее изменение параметра поврежденности как функции времени. Для нахождения параметров КРН материала, вводимых предлагаемой моделью, необходимо знать результаты механических испытаний на растяжение предварительно нагруженных образцов без нагрузки и на растяжение образцов под нагрузкой в водородсодержащей среде. Проанализирован процесс аккумуляции повреждений в металлах в условиях КРН для образца, подвергнутого статической нагрузке, растяжению с постоянной скоростью деформации и для случая сложного напряженного состояния с постоянным тензором напряжений. Результаты данных исследований легли в основу диссертации Ширяевой Людмилы Константиновны «Моделирование процесса накопления поврежденности в металлах в условиях коррозионного растрескивания под напряжением», научный руководитель В.И. Астафьев. Следующий цикл работ связан с анализом напряженно-деформированного состояния вблизи наклонной трещины в материале со степенными определяющими уравнениями. В.И. Астафьевым и А.Н. Крутовым решена задача определения напряженного состояния вблизи вершины наклонной трещины в среде со степенными конститутциональными уравнениями. Для асимптотического решения задачи используется условие совместности в напряжениях, в которое вводится функция напряжений Эри, для которой, в свою очередь, метод разделения переменных редуцирует задачу к двухточечной краевой задаче. Полученная краевая задача решается численно с использованием нового оригинального алгоритма, разработанного специально для решения задач смешанного нагружения. Решение получено для случаев плоского напряженного состояния (ПНС) и плоской деформации (ПД).

Данное направление исследований получило поддержку РФФИ, проект 99-01-01246 «Влияние поврежденности и структуры материала на характер докритического развития трещины». А.Н. Крутов представил и успешно защитил диссертацию «Математическое моделирование докритического развития наклонных трещин в условиях ползучести» по специальности 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела». Весь цикл работ, выполненных за 1985–1999 гг. на кафедре механики деформируемого твердого тела, нашел свое отражение в двух монографиях, опубликованных в 1999 году «Прикладные задачи механики разрушения» и в 2001 году «Нелинейная механика разрушения». Издание монографии «Прикладные задачи механики разрушения» было поддержано РФФИ, проект 00-01-14029. Научную и преподавательскую деятельность В.И. Астафьев сочетал с работой проректора по научно-исследовательской работе в 1994–1999 гг., председателя диссертационного совета по механике деформируемого твердого тела, декана механико-математического факультета 2000–2009 гг.

Приоритетным направлением деятельности В.И. Астафьева на должности проректора по научной работе стало создание компьютерной сети в университете и обеспечение доступа к международной сети INTERNET. В 1994 году в рамках проекта международной ассоциации ИНТАС был создан канал, связавший Москву и Самару. В.И. Астафьев фактически возглавил, организовал вместе с сотрудниками Самарского университета включение информационных ресурсов Самарского университета во Всемирную компьютерную сеть. Для реализации данного проекта в 1994 году был организован семинар (<https://ngip.ru/istoriia-internet-v-samare.html>), где впервые были собраны непосредственные участники проекта (А.Л. Санников, А.М. Сухов, Л.В. Чумаков и др.). Более подробно с идеями проекта можно познакомиться в статье: Астафьев В.И., Зинченко В.Н., Соловов А.В., Камаев В.П., Фридман Л.М., Сухов А.М., Санников А.Л., Чумаков Л.В. Проект создания единого информационного пространства Самарской области в сфере науки, образования, культуры, здравоохранения и социального обеспечения // Вестник Самарского государственного университета 1995. с. 198–204.

При поддержке В.И. Астафьева проект был успешно реализован и в аудитории 411 механико-математического факультета на кафедре В.И. Астафьева впервые был осуществлен доступ

к сети Internet. В настоящее время здесь находится созданная в то время кафедра безопасности информационных систем.

С именем В.И. Астафьева связано рождение научного журнала «Вестник Самарского университета. Естественная серия», первый специальный выпуск которого вышел в свет в 1995 году и содержал работы сотрудников Самарского университета, получивших поддержку РФФИ.

Работая проректором по научной работе Самарского университета, В.И. Астафьев занимался не только научной деятельностью, но и был инициатором развития новых направлений подготовки специалистов в Самарском университете. По его непосредственной инициативе в 1999 году было открыто направление подготовки по специальности «Компьютерная безопасность», а в 2000 году открыто направление подготовки по специальности «Организация и технология защиты информации». В связи с открытием новых специальностей в 2002 году была создана новая кафедра «Безопасность информационных систем», которую он и возглавил. Это показывает, что В.И. Астафьев имел широкий кругозор, что позволяло рассматривать научную и учебную деятельность с перспективой на будущее.

В.И. Астафьев был вовлечен в организацию и проведение Всероссийской сессии научного совета РАН по механике деформируемого твердого тела «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики деформируемого твердого тела», Самара, 2007 г. В 2005 и 2007 гг. Владимир Иванович совместно с д.ф.-м.н., проф. Л.С. Пулькиной активно участвует в организации и проведении Всероссийской конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения». В 2008 г. тематика исследований В.И. Астафьева была снова поддержана грантом РФФИ (проект 08-01-99023) «Теоретическое и экспериментальное исследование зон необратимых деформаций вблизи концентраторов напряжений». С 8 по 13 сентября 2008 г. Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук и Самарский государственный университет провели Первую международную конференцию «Математическая физика и ее приложения», которая явилась большим событием для всего математического сообщества нашей страны. Одним из организаторов конференции был В.И. Астафьев.



Рис. 4. Нижний Новгород, 2006 год. Владимир Иванович Астафьев на IX Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике. Слева с к.ф.-м.н. М.В. Юмашевым, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)

Fig. 4. Nizhny Novgorod, 2006. Vladimir Ivanovich Astafyev at the IX All-Russian Congress on Theoretical and Applied Mechanics. On the left with Candidate of Physical and Mathematical Sciences M.V. Yumashev, Lomonosov Moscow State University

В сентябре 2008 года самарская пресса писала: «Сегодня, 8 сентября, в Самарской области начинается международная конференция по математической физике и ее приложениям, сообщили корреспонденту ИА REGNUM-ВолгаИнформ в департаменте информационной политики и

взаимодействия с институтами гражданского общества аппарата Правительства Самарской области. В конференции примут участие профессор, директор Центра Вито Вольтера Римского университета «Тор Вергата» Луиджи Аккарди (Италия), профессор, декан факультета естественных наук и технологий Университета Токио Масанори Ойя (Япония), профессор, директор междисциплинарного центра математического моделирования Университета Вексио Андрей Хренников (Швеция) и др. На конференции будут заслушаны доклады «Математическая физика и квантовая теория поля», «Квантовая теория и неколомгоровская вероятность», «Квантовая биоинформатика», «Математическое моделирование в квантовой физике, психологии и экономике». Кроме того, будет рассмотрен вопрос о подготовке специалистов по математике, механике и физике в Самарской области». В рамках сложившегося сотрудничества механико-математического факультета с Математическим институтом им. В.А. Стеклова 5 ноября 2009 года в Самарском государственном университете состоялись лекции заведующего отделом математической физики Математического института им. В.А. Стеклова РАН д.ф.-м.н. Игоря Васильевича Воловича.



Рис. 5. Аделаида, Австралия, 24–30 августа 2008 г., 22-й Международный конгресс по теоретической и прикладной механике (ICTAM 2008), Михаил Николаевич Осипов, Татьяна Константиновна и Владимир Иванович Астафьевы

Fig. 5. Adelaide, Australia, August 24–30, 2008, 22nd International Congress on Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2008), Mikhail Nikolaevich Osipov, Tatyana Konstantinovna and Vladimir Ivanovich Astafyev

Параллельно с организацией международной конференции В.И. Астафьев проводит большую работу, нацеленную на создание первой на механико-математическом факультете магистерской программы «Механика деформируемого твердого тела», которая была открыта в 2009 году, и первый выпуск магистров состоялся в 2011 году. С тех пор образовательная программа по механике деформируемого твердого тела успешно ведет подготовку по направлению 01.04.03 «Механика и математическое моделирование» и уже насчитывает 13 выпусков.

Несмотря на большой объем организационной работы, В.И. Астафьев активно занимается научными исследованиями и его интересы фокусируются на задачах математического моделирования фильтрации жидкости при наличии трещины гидравлического разрыва пласта, когда трещина представляется в виде тонкого эллипса, пересекающего скважину. Математический аппарат ТФКП позволяет найти точное решение для величины скин-фактора, отражающего влияние трещины ГРП на продуктивность скважины. Тогда же выходит целая серия публикаций, предметом которых является исследование фильтрации вязкой жидкости в системе периодически расположенных скважин. Система скважин моделируется с помощью плоской бесконечной двоякопериодической решетки точечных стоков одинаковой мощности. Создана и развита математическая модель, описывающая зависимость течения жидкости от структуры решетки. В.И. Астафьев и его ученик П.В. Ротерс рассмотрели проблему продуктивности двоякопериодических систем добывающих скважин. На основании математической модели работы скважины с постоянной скоростью притока было получено аналитическое представление для коэффициента продуктивности скважины и проведен анализ его значений в зависимости от формы контура питания. Дополнительно было получено аналитическое представление для факторов формы Дитца, которое хорошо согласуется с результатами численного расчета методом мнимых источников. Анализ продуктивности многоскважинных двоякопериодических систем вертикальных добывающих скважин лег в основу диссертации П.С. Ротерса «Моделирование разработки нефтяных месторождений



Рис. 6. 10 июня 2011 года. Владимир Иванович Астафьев на защите магистерских диссертаций первого выпуска магистратуры «Механика деформируемого твердого тела», Самарский университет)
Fig. 6. June 10, 2011. Vladimir Ivanovich Astafyev at the defense of Master's theses of the first graduating class of the Master's Degree program «Mechanics of Deformable Solids», Samara University

с использованием функций Вейерштрасса» на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы». В.И. Астафьевым и П.С. Ротерсом получено аналитическое решение уравнения пьезопроводности, которое описывает процесс фильтрации жидкости в двоякопериодических системах добывающих скважин. Решение может быть использовано для математического моделирования первичной разработки нефтяных месторождений. В этом же цикле работ проведен анализ оптимального размещения скважин нефтяного месторождения, разрабатываемого с помощью двоякопериодической схемы расположения скважин. Получено точное выражение для вычисления коэффициента формы питания скважины, связывающего продуктивность скважины с геометрической формой ее области питания.

С 2014 года Владимир Иванович Астафьев начинает работать в Самарском государственном техническом университете на кафедре разработки и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений, где продолжает исследования задач с неизвестной границей (границей водонефтяного контакта), которые имеют принципиальное значение в проектировании разработки нефтяных месторождений методом заводнения. Владимир Иванович занимается математическим моделированием процессов нелинейной фильтрации флюидов нефтяных и газовых месторождений. В это время В.И. Астафьевым и А.Е. Касаткиным предложены новые оригинальные модели и техники решения плоских квазистационарных задач параболического типа с подвижной границей, разработан новый метод решения плоских задач заводнения в двоякопериодической области. Математическая модель зиждется на системе двух связанных уравнений: сингулярного интегрального и дифференциального. Сингулярное интегральное уравнение служит для отыскания скорости фильтрации на подвижной границе. Результат решения сингулярного интегрального уравнения используется для построения правой части дифференциального уравнения. Прогнозирование перемещения границы «нефть-вода» имеет большое значение для задач проектирования разработки нефтяных месторождений методом заводнения: знание характера взаимосвязанного движения вытесняемой нефти и вытесняющей воды в пласте позволяет оптимизировать систему разработки нефтяных месторождений. Простейшей моделью совместной фильтрации нефти и воды является модель «разноцветных» жидкостей, которая предполагает, что нефть и вода обладают одинаковыми или сходными физическими свойствами (плотностью и вязкостью). В.И. Астафьев и А.Е. Касаткин рассмотрели более сложную модель «поршневого» вытеснения нефти и воды, которая учитывает различия в вязкости и плотности двух жидкостей. Предполагается, что нефтяной пласт однороден и бесконечен, имеет фиксированную толщину и постоянные значения коэффициентов пористости и проницаемости. Пласт разрабатывается группой из конечного числа добывающих и нагнетательных скважин, повторяющихся в двух направлениях (дважды периодический кластер). Фильтрация жидкостей описывается законом Дарси. Предполагается, что жидкости слабо сжимаемы, а давление в пласте удовлетворяет квазистационарному уравнению диффузии. Модель поршневого перемещения приводит к разрыву тангенциальной составляющей вектора скорости на границе контакта «нефть-вода». Использование теории эллиптических функций в сочетании с обобщенными интегралами Коши сводит задачу нахождения текущих границ контакта «нефть-вода»

к системе сингулярных интегральных уравнений для тангенциальной и нормальной составляющих вектора скорости и задаче Коши для интегрирования дифференциальных уравнений движения нефти — граница контакта с водой. Разработан алгоритм численного решения этой задачи. Проведен мониторинг движения границы нефть-вода для различных схем заводнения (линейно-рядная, 4-, 5-, 7- и 9-точечная и т. д.). Результаты данного цикла работ составили содержание диссертационной работы А.Е. Касаткина «Математическое моделирование и численное решение плоских квазистационарных задач параболического типа с подвижной границей» по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Работа выполнялась при поддержке проекта 14-01-97041 РФФИ «Эллиптические функции в задачах моделирования разработки нефтяных месторождений».

Полученные результаты позволили В.И. Астафьеву получить поддержку Российского научного фонда (проект 15-17-00019) «Способ разработки месторождений тяжелой высоковязкой нефти с возможностью энергосберегающего прогрева пласта и предупреждения выноса песка в добывающие скважины».

В последние годы Владимир Иванович Астафьев входил в состав диссертационного совета 99.2.039.02 по специальностям 1.1.8 «Механика деформируемого твердого тела» и 2.6.17 «Материаловедение», активно работая с диссертациями, поступающими в совет. Очень ценным было выступление В.И. Астафьева на защите диссертационной работы Р.М. Жаббарова (2022 г.), поддержавшего работу, обратившего внимание на необходимость фундаментальных, теоретических исследований.

Сейчас не стало Владимира Ивановича Астафьева, не стало человека, ученого, оказавшего историческое влияние на развитие механико-математического факультета университета, на ключевые научные направления, сформировавшиеся в университете, на профессиональные пути многих учеников Владимира Ивановича, работающих в настоящее время в университете и за его пределами. Вся его научная и преподавательская деятельность, сочетающая и объединяющая современные и классические методы механики сплошных сред, его широчайшая научная эрудиция, свободное владение новыми вычислительными технологиями и тонкими математическими методами были нацелены на подготовку высокообразованных специалистов, которые сейчас продолжают дело Владимира Ивановича Астафьева. Научные направления и идеи в механике деформируемого твердого тела и механике жидкости и газа, в их фундаментальной теоретической составляющей и важных прикладных аспектах, начало которых заложил Владимир Иванович Астафьев, будут жить и развиваться в работах его коллег и многочисленных учеников.

Монографии, книги и учебные пособия В.И. Астафьева

Динамика неустойчивых процессов заводнения нефтяных пластов и фильтрация при наличии трещин в поровом объеме / В.И. Астафьев, В.А. Ольховская, А.М. Зиновьев, А.Е. Касаткин, Е.В. Андриянова, С.И. Губанов. Самара: АНО «Издательство СНЦ», 2019. 192 с.

Астафьев В.И., Касаткин А.Е. Атлас схем заводнения. Самара: СНЦ, 2016. 70 с.

Астафьев В. И. Эллиптические функции в задачах моделирования разработки нефтяных месторождений / В.И. Астафьев, П.В. Ротерс. Самара: Изд-во «Самарский университет», 2014. 162 с. ISBN 978-5-86465-646-4.

Астафьев В.И. Нелинейная механика разрушения / В.И. Астафьев, Ю.Н. Радаев, Л.В. Степанова. Самара: Изд-во «Самарский университет», 2001. 632 с. ISBN 5-86465-181-8.

Астафьев В.И., Радаев Ю.Н., Степанова Л.В. Прикладные задачи механики разрушения. Самара: Изд-во «Самарский университет», 1999. 193 с. ISBN: 5-230-06204-5.

Астафьев В.И. Накопление поврежденности и коррозионное растрескивание металлов под напряжением / В.И. Астафьев, Л.К. Ширяева. Самара: Изд-во «Самарский университет», 1998. 123 с. ISBN 5-230-06155-3.

Список диссертаций, защищенных под руководством В.И. Астафьева

Касаткин А.Е. Математическое моделирование и численное решение плоских квазистационарных задач параболического типа с подвижной границей: специальность 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Касаткин Андрей Евгеньевич. Самара, 2015. 195 с.

Ротерс П.В. Моделирование разработки нефтяных месторождений с использованием функций Вейерштрасса: специальность 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Ротерс Павел Вячеславович. Самара, 2015. 118 с.

Федина М.Е. Связанные задачи механики трещин в теории ползучести с поврежденностью: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Федина Мария Ефимовна. Самара, 2004. 154 с.

Горелова В.В. Моделирование наведения остаточных напряжений в элементах конструкций в условиях ползучести : специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: диссертация

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: защищена 18.12.03 / Горелова Виктория Викторовна. Самара, 2003. 123 с.

Крутов А.Н. Математическое моделирование докритического развития наклонных трещин в условиях ползучести: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Крутов Алексей Николаевич. Самара, 2002. 153 с.

Бондаренко В.В. Математическая модель докритического роста трещин в условиях ползучести при постоянной и переменной нагрузке: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Бондаренко Владимир Владимирович. Самара, 2001. 115 с.

Ширяева Л.К. Моделирование процесса накопления поврежденности в металлах в условиях коррозионного растрескивания под напряжением: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Ширяева Людмила Константиновна. Самара, 1997. 17 с.

Логинов О.А. Анализ развития фронта разрушения в элементах конструкций при ползучести: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Логинов Олег Александрович. Самара, 1994. 121 с.

Пастухов В.А. Модель роста трещины в условиях ползучести: специальность 01.02.04 «Механика деформируемого твердого тела»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Пастухов Виктор Алексеевич. Куйбышев, 1987. 109 с.

Список наиболее важных публикаций В.И. Астафьева

- [1] Астафьев В. И. Моделирование течения вязкой жидкости по трубам с проницаемыми стенками // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2022. Т. 29, № 1. С. 35–38.
- [2] Определение критической величины раскрытия трещины (CTOD) по испытаниям образцов на трехточечный изгиб / В.Н. Кожин, В.И. Астафьев, А.В. Иоффе [и др.] // Вестник евразийской науки. 2021. Т. 13, № 3.
- [3] Губанов С.И., Астафьев В.И., Ольховская В.А. Определение геометрических параметров трещины при высокоэнергетическом импульсном воздействии на пласт // Инженер-нефтяник. 2019. № 4. С. 27–33.
- [4] Математическое описание гидродинамических процессов в условиях нелинейной фильтрации. Критические градиенты давления / О.Н. Шевченко, И.А. Кибаленко, О.Ю. Кашников, В.И. Астафьев // Нефтепромысловое дело. 2018. № 7. С. 12–18. DOI: 10.30713/0207-2351-2018-7-12-18.
- [5] Шевченко О.Н., Астафьев В.И., Ольховская В.А. Способ определения начального дебита горизонтальной скважины в низкопроницаемом коллекторе в условиях многостадийного гидроразрыва пласта // Технологии нефти и газа. 2018. № 3(116). С. 39–43.
- [6] Astafev V.I., Podyacheva V.E. Simulation of the inflow to a well equipped with a vertical slot filter // Lecture Notes in Electrical Engineering. 2019. Vol. 489. P. 33–38.
- [7] Astafev V.I., Gubanov S.I., Olkhovskaya V.A., Silantyeva A.M., Zinovyev A.M. Analytical filtration model for nonlinear viscoplastic oil in the theory of oil production stimulation and heating of oil reservoir in a dual-well system // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. 2018. Vol. 121(5). 052023.
- [8] Astafev V.I., Andriyanova E.V., Kasatkin A.E. Modeling of the waterflooding process in the presence of discontinuities in the oil reservoirs Lecture Notes in Electrical Engineering, 2018. Vol. 428, pp. 37–43. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-53934-8>
- [9] Андриянова Е.В., Астафьев В.И. Граничные условия для задачи фильтрации жидкости при наличии несплошности нефтяного пласта // Вестник Башкирского университета. 2017. Т. 22, № 1. С. 28–33.
- [10] Astafev V.I., Shevchenko O.N., Kibalenko O.A. The mathematical model of the filtration process in horizontal wells for the high viscosity oil fields // International Journal of Mechanics. 2017. Vol. 11, С. 242–250.
- [11] Astafev V.I., Markelova A.M., Olkhovskaya V.A., Zinovyev A.M. Modelling of non-linear viscoplastic oil flow to a well and development system selection // Journal of Petroleum Exploration and Production Technology, 2017. Vol. 7(2). pp. 521–529. <https://doi.org/10.1007/s13202-016-0274-2>
- [12] Andriyanova E.V., Astaf'ev V.I. Computational method for fluid flow process in porous media with heterogeneity of permeability // Proceedings of the 7th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. COUPLED PROBLEMS 2017. 2017. P. 697–704
- [13] Андриянова Е.В., Тянь В.К. Derivation of Boundary Conditions for Homogeneous Reservoir with Fractures // International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. 2017. Vol. 11. P. 206–211.
- [14] Shevchenko O.N., Astafev V.I. The calculation of the flow rate of horizontal wells in conditions of nonlinear filtering // Horizontal Wells. 2017.

- [15] Астафьев В.И., Ольховская В.А., Губанов С.И. Прогрев пласта в скважине с дуальной системой стволов и интенсификация добычи высоковязкой нефти // Нефтяное хозяйство. 2016. № 2. С. 66–69.
- [16] Астафьев В.И., Касаткин А.Е. Numerical Solution of the Moving Boundary-Value Problem Based on the Model of Piston-Like Oil Displacement AIP Conference Proceedings, Vol. 1738. Pp. 480062-1–480062-4 (год публикации — 2016) <https://doi.org/10.1063/1.4952298>,
- [17] Астафьев В.И., Касаткин А.Е. Modeling and numerical calculation of waterflooding using the Weierstrass elliptic functions International Journal of Mechanics, 2016. Vol. 10. Pp. 182–191.
- [18] Астафьев В.И., Маркелова А.М., Ольховская В.А., Зиновьев А.М. Modeling of Non-linear Viscoplastic Oil Flow to a Well and Development System Selection Journal of Petroleum Exploration and Production Technology, (год публикации — 2016). <https://doi.org/10.1007/s13202-016-0274-2>.
- [19] Андриянова Е.В., Астафьев В.И. Влияние неоднородности пласта по проницаемости на фильтрационное течение пластовой жидкости к добывающим скважинам // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Технические науки. 2015. № 3(47). С. 154–161.
- [20] Астафьев В.И., Касаткин А.Е. Моделирование и численный расчет поршневого вытеснения нефти для двоякопериодических систем разработки месторождений // Вычислительная механика сплошных сред. 2015. Т. 8, № 1. С. 81–92. DOI: 10.7242/1999-6691/2015.8.1.7.
- [21] Markelova A.M., Astafev V.I., Zinoviev A.M., Olkhovskaya V.A. Analytical Model on Nonlinear Visco-plastic Oil Influx to the Well and the Choice of Development System // Ciencia e Tecnica Vitivinicola. 2015. Vol. 30, № 10.
- [22] Astafev V. Kasatkin A. Numerical Solution of Piston-like Oil Displacement for Periodic Systems of Oil Fields Development // Recent Advances on Computational Science and Applications. 2015. P. 37–42.
- [23] Astafev V.I., Roters P.V. Analytical solution for a double-periodic multi-well reservoir systems // Ciencia e Tecnica Vitivinicola. 2014. Vol. 29, № 3. P. 244–252.
- [24] Astaf'ev V.I., Roters P.V. Simulations of oil recovery using the Weierstrass elliptic functions // International Journal of Mechanics. 2014. Vol. 8. P. 353–364.
- [25] Астафьев В.И., Ротерс П.В. Моделирование и оптимизация разработки месторождений многоскважинными двоякопериодическими кластерами // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. 2013. № 9–2(110). С. 170–183.
- [26] Астафьев В.И., Яковлев А.С. Тонкостенные пластины и оболочки с несквозными трещиновидными дефектами в упругопластическом приближении // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королева (национального исследовательского университета). 2012. № 5–1(36). С. 73–78.
- [27] Астафьев В.И., Ротерс П.В. Моделирование двоякопериодических систем добывающих скважин. 2. Коэффициент продуктивности // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. 2011. № 8(89). С. 118–127.
- [28] Астафьев В.И., Ротерс П.В. Моделирование двоякопериодических систем добывающих скважин // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. 2010. № 4(78). С. 5–11.
- [29] Астафьев В.И. Автомодельные решения задачи о развитии трещины гидроразрыва нефтяного пласта // Обзорные прикладной и промышленной математики. 2008. Т. 15, № 2. С. 257.
- [30] Астафьев В. И. Эллиптические функции в задаче фильтрации жидкости в двоякопериодической системе скважин // Обзорные прикладной и промышленной математики. 2008. Т. 15, № 2. С. 258.
- [31] Астафьев В.И., Федорченко Г.Д. Моделирование фильтрации жидкости при наличии трещины гидравлического разрыва пласта // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Физико-математические науки. 2007. № 2(15). С. 128–132.
- [32] Астафьев В.И., Федорченко Г.Д. Автомодельное решение задачи о развитии трещины гидроразрыва пласта // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. 2007. № 4(54). С. 34–41.
- [33] Астафьев В.И., Степанова Л.В. Асимптотика дальнего поля напряжений в задаче о росте трещины в условиях ползучести в среде с поврежденностью // Известия Российской академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 2005. № 2. С. 145–154.
- [34] Астафьев В.И., Крутов А.Н. Распределение напряжений вблизи вершины наклонной трещины в нелинейной механике разрушения // Известия Российской Академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 2001. № 5. С. 125–133.
- [35] Астафьев В.И., Крутов А.Н. Распределение напряжений вблизи вершины наклонной трещины в нелинейной механике разрушения // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. 1999. № 4(14). С. 56–69.
- [36] Methods of increasing the corrosion resistance of oil pipelines / V.D. Makarenko, S.P. Shatilo, V.I. Astaf'ev, Z.A. Udovikova // Welding International. 1998. Vol. 12, No. 12. P. 988–991. DOI: 10.1080/09507119809448548.

- [37] Астафьев В.И., Ширияева Л.К. Накопление поврежденности в металлах в условиях коррозионного растрескивания под напряжением // Известия Академии наук. Механика твердого тела. 1997. № 3. С. 115–124.
- [38] Астафьев В.И., Степанова Л.В. Влияние поврежденности материала на напряженно-деформированное состояние в окрестности вершины трещины для дробно-линейного закона ползучести // Вестник Самарского государственного университета. Естественнонаучная серия. 1997. № 2(4). С. 135–141.
- [39] Астафьев В.И., Радаев Ю.Н., Степанова Л.В. Задача о разгрузке для трещины Дагдейла // Вестник Самарского государственного университета. Естественнонаучная серия. 1997. № 4(6). С. 103–114.
- [40] Astafjev V.I., Stepanova L.V., Shesterikov S.A. Crack tip asymptotic character of anti-plane stress and strain rate for linear fractional constitutive relations // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 1996. Vol. 24, No. 3. P. 263–268. DOI: 10.1016/0167-8442(95)00049-6.
- [41] Астафьев В.И., Федорченко Д.Г., Цыпкайкин И.Н. Оценка влияния формы цикла нагружения на циклическую долговечность // Проблемы машиностроения и надежности машин. 1996. № 2. С. 44.
- [42] Астафьев В.И., Ширияева Л.К. Развитие трещин в охрупчивающейся упруго-пластической среде // Вестник Самарского государственного университета. Естественнонаучная серия. 1996. № 2(2). С. 60–74.
- [43] Астафьев В.И., Степанова Л.В., Шестериков С.А. Асимптотика напряженно-деформированного состояния в окрестности вершины трещины в условиях ползучести // Вестник Самарского государственного университета. 1995. № 5. С. 59–64.
- [44] Астафьев В.И., Григорова Т.В. Распределение напряжений и поврежденности у вершины растущей в процессе ползучести трещины // Известия Российской Академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 1995. № 3. С. 160–166.
- [45] Астафьев В.И., Зинченко В.Н., Соловов А.В., Камаев В.П., Фридман Л.М., Сухов А.М., Санников А.Л., Чумаков Л.В. Проект создания единого информационного пространства Самарской области в сфере науки, образования, культуры, здравоохранения и социального обеспечения // Вестник Самарского государственного университета. 1995. с. 198–204.
- [46] Оценка склонности сталей к сульфидному коррозионному растрескиванию под напряжением / В.И. Астафьев, Д.Ю. Рагузин, Т.В. Тетюева, П.С. Шмелев // Заводская лаборатория. 1994. Т. 60, № 1. С. 37–40.
- [47] Astafjev V.I., Artamoshkin S.V., Tetyueva T.V. Influence of Microstructure and Non-metallic Inclusions on Sulphide Stress Corrosion Cracking in Low-Alloy Steels // International Journal of Pressure Vessels and Piping. 1993. Vol. 55, No. 2. P. 243–250. DOI: 10.1016/0308-0161(93)90032-O.
- [48] Astaf'ev, V.I., Grigorova T.V., Pastukhov V.A. Effect of damage in the material on the stress-strain state in the vicinity of the crack tip in creep // Soviet Materials Science. 1993. Vol. 28, No. 1. P. 1–6. DOI: 10.1007/BF00723622.
- [49] Astaf'ev V.I., Grigor'eva T.V., Pastukhov V.A. Influence of material damage conditions on stress-strain state near the crack tip under creep // Fiziko-Khimicheskaya Mekhanika Materialov, 1992. 28(1), pp. 5–11.
- [50] Astaf'ev V.I., Pastukhov V.A. Modeling of crack growth under creep conditions. Report 2. Crack kinetics // Strength of Materials. 1991. Vol. 23, No. 5. P. 493–496. DOI: 10.1007/BF00771445.
- [51] Astaf'ev V.I., Pastukhov V.A. Modeling of crack growth under creep conditions. Report 1. Statement of the problem // Strength of Materials. 1991. Vol. 23, No. 5. P. 489–492. DOI: 10.1007/BF00771444.
- [52] Астафьев В.И. Структурные параметры и длительная прочность металлов в условиях ползучести // Прикладная механика и техническая физика. 1987. Т. 28, № 6. С. 156.
- [53] Астафьев В.И. Описание процесса разрушения в условиях ползучести // Известия Академии наук СССР. Сер.: Механика твердого тела. 1986. № 4. С. 164–169.
- [54] Астафьев В.И. Закономерности подрастания трещин в условиях ползучести // Известия Академии наук СССР. Сер.: Механика твердого тела. 1986. № 1. С. 127–134.
- [55] Астафьев В.И. Докритическое подрастание трещины при ползучести под действием переменной нагрузки // Прикладная механика и техническая физика. 1985. Т. 26, № 3. С. 152.
- [56] Астафьев В.И. Асимптотика напряжений у вершины растущей в процессе ползучести трещины с учетом накопления поврежденности // Доклады академии наук СССР. 1984. Т. 279, № 6. С. 1327.
- [57] Астафьев В.И. Влияние нестационарности поля напряжений на рост трещины при ползучести // Прикладная механика и техническая физика. 1983. Т. 24, № 3(139). С. 148–152.
- [58] Астафьев В.И. О диссипативном критерии разрушения при ползучести // Прикладная механика и техническая физика. 1983. Т. 24, № 4(140). С. 167–170.
- [59] Астафьев В. И. К вопросу о поврежденности и критериях разрушения при ползучести // Проблемы прочности. 1983. № 3. С. 11–13.

- [60] Астафьев В.И. О росте трещин при ползучести с учетом пластической зоны вблизи вершины трещины // Прикладная механика и техническая физика. 1979. Т. 20, № 6(118). С. 154–158.
- [61] Астафьев В.И., Мешков С.И. Вынужденные колебания полубесконечного стержня из нелинейного наследственно-упругого материала // Известия Академии наук СССР. Сер.: Механика твердого тела. 1970. № 4. С. 93–98.



Editorial Article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-7-22

Submitted: 15.02.2024

Revised: 20.02.2024

Accepted: 28.02.2024

L.V. Stepanova

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: stepanova.lv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6693-3132>

M.N. Osipov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: osipov.mn@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8104-5002>

M.E. Fedina

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: phedina.me@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8899-1926>

N.V. Voropaeva

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: voropaeva.nv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0003-7242-4590>

A.N. Krutov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: krutov.an@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-5196-3586>

V.V. Bondarenko

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: bondarenko.vv@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-2306-2017>

IN MEMORY OF VLADIMIR IVANOVICH ASTAFYEV (30.11.1948–08.02.2024)

ABSTRACT

The article is dedicated to the memory of Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor Vladimir Ivanovich Astafyev, whose professional activity for more than 35 years has been associated with Samara University. Scientific, teaching and organizational activities of V.I. Astafyev largely determined and will determine the scientific directions developed at the Faculty of Mechanics and Mathematics, and the educational activity at the Faculty of Mechanics and Mathematics. His boundless dedication to the university, his broad and deep education, and high mathematical culture allowed him to educate the whole pleiades of scientists and professors currently working at the university.

Citation. Stepanova L.V., Osipov M.N., Fedina M.E., Voropaeva N.V., Krutov A.N., Bondarenko V.V. In memory of Vladimir Ivanovich Astafyev (30.11.1948 – 08.02.2024). *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 7–22. DOI: <https://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-7-22>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Stepanova L.V., Osipov M.N., Fedina M.E., Voropaeva N.V., Krutov A.N., Bondarenko V.V. 2024

Larisa V. Stepanova — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, head of the Department of Mathematical Modelling in Mechanics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation. *Michail N. Osipov* — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, head of the Department of Information Security, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Marya E. Fedina — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, associate professor of the Department of Information Security, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Natalia V. Voropaeva — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, associate professor of the Department of Differential Equations and Control Theory, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Alexei N. Krutov — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, associate professor of the Department of Information Security, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Vladimir V. Bondarenko — associate professor of the Department of Information Security, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

МАТЕМАТИКА

MATHEMATICS



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-23-30

УДК 517.956

Дата: поступления статьи: 15.01.2024
после рецензирования: 19.02.2024
принятия статьи: 28.02.2024

С.Т. Гусейнов

Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджанская Республика
E-mail: sarvanhuseynov@rambler.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-7473-2269>

М. Дж. Алиев

Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджанская Республика
E-mail: a.mushfiq@rambler.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9084-6251>

НЕКОТОРЫЕ ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ РЕШЕНИЙ ДЛЯ НЕРАВНОМЕРНО ВЫРОЖДАЮЩИХСЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

АННОТАЦИЯ

В данной статье рассмотрен класс эллиптических уравнений второго порядка дивергентной структуры с неравномерным степенным вырождением. Подход, используемый в настоящей статье, основан на том, что скорости вырождения собственных чисел матрицы $\|a_{ij}(x)\|$ (функции $\lambda_i(x)$) являются не функциями необычной нормы $|x|$, а некоторого анизотропного расстояния $|x|_a$. Предполагается, что задача Дирихле для таких уравнений разрешима в классическом смысле при любой непрерывной граничной функции в любой нормальной области Ω .

Для слабых решений получены оценки вблизи граничной точки решений задачи Дирихле, функции Грина для неравномерно вырождающихся эллиптических уравнений второго порядка.

Ключевые слова. равномерная эллиптичность; неравномерное вырождение; фундаментальное решение.

Цитирование. Гусейнов С.Т., Алиев М.Дж. Некоторые вспомогательные оценки решений для неравномерно вырождающихся эллиптических уравнений второго порядка // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 23–30. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-23-30>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Гусейнов С.Т., Алиев М.Дж., 2024

Сарван Тахмаз оглы Гусейнов — доктор математических наук, доцент кафедры высшей математики, Бакинский государственный университет, AZ 1148, Азербайджанская Республика, г. Баку, ул. З. Халилова, 23.

Мушфи́г Джала́л оглы Алиев — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики, Бакинский государственный университет, AZ 1148, Азербайджанская Республика, г. Баку, ул. З. Халилова, 23.

1. Предварительные сведения

Пусть в n -мерном евклидовом пространстве E_n точек $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $n \geq 2$ расположена ограниченная область Ω с границей $\partial\Omega$, причем $0 \in \partial\Omega$.

Рассмотрим в Ω эллиптическое уравнение

$$Lu = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (1.1)$$

в предположении, что коэффициенты $a_{ij}(x)$ являются измеримыми функциями в Ω , $a_{ij}(x) = a_{ji}(x)$, $i, j = 1, 2, \dots, n$ и, кроме того, для $\xi \in E_n, x \in \Omega$

$$\mu \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \xi_i^2 \leq \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \leq \mu^{-1} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \xi_i^2, \quad (1.2)$$

здесь $\mu \in (0, 1]$ — некоторая константа и

$$\lambda_i(x) = (|x|_{a^-})^{\alpha_i}, \quad |x|_{a^-} = \sum_{i=1}^n |x_i|^{\frac{2}{2+\alpha_i}}, \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.3)$$

Отметим, что для равномерно эллиптических уравнений 2-го порядка дивергентной структуры доказательство оценки убывающего решения можно найти в [1; 2]. Настоящая статья тесно связано по тематике с работами [3–12].

Для равномерно эллиптических уравнений соответствующие результаты получены в работе [13]. Что касается неравномерно вырождающихся эллиптических уравнений 2-го порядка, то отметим в этой связи работу [14].

Функция $u(x) \in \overset{\circ}{W}_{2,\Lambda}^1(\Omega)$ называется слабым решением уравнения (1.1), если при всякой $\psi(x) \in \overset{\circ}{W}_{2,\Lambda}^1(\Omega)$ выполнено интегральное тождество

$$\int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} dx = 0.$$

Введем некоторые обозначения:

$$S_r = \{x : |x| \leq r\}, \quad C_r = S_r \cap \bar{\Omega},$$

Пусть $\Gamma(x)$ — фундаментальное решение оператора L в R^n с особенностью в точке 0, $\rho(x) = [\Gamma(x)]^{\frac{1}{2-n}}$, $T_r = \{x : \rho(x) \leq r\}$. Как показано в [10; 11], существует такая зависящая только от μ и n постоянная α , что в R^n

$$2\alpha |x| \leq \rho(x) \leq (2\alpha)^{-1} |x|, \quad (1.4)$$

что эквивалентно включению $S_r(2\alpha) \subset T_r \subset S_r(\frac{1}{2\alpha})$.

Положим

$$\frac{1}{\sqrt{n}} (2\alpha)^{\frac{1+\alpha^+}{2}} = 2\lambda_1.$$

Введем еще обозначения: $K_{r_1, r_2} = S_{r_1} \setminus S_{r_2}$, $Q_{r_1, r_2} = T_{r_1} \setminus T_{r_2}$, $\alpha^+ = \max\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$,

$$M_r(u) = r^{-n} \int_{K_{\alpha^{-1}r, ar}} u^2 dx,$$

$\text{cap}(E)$ — гармоническая емкость множества E , $\gamma(r) = r^{2-n} \text{cap}(C_r)$ — относительная емкость $\bar{\Omega}$ в шаре S_r .

2. Основные вспомогательные леммы

В этом пункте через u обозначим функцию из пространства $W_2^1(S_\delta)$ ($\delta = \text{const} > 0$), удовлетворяющую в $\Omega \cap S_\delta$ уравнению $Lu = 0$ и равную нулю на C_δ .

Лемма 1. Пусть

$$J(r) \equiv \frac{1}{2-n} \int_{\partial T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j dS_x, \quad (2.1)$$

где $r < \delta$ и $\{n_j\}$ — проекции единичной внешней нормали к ∂T_r на координатные оси. Тогда

$$2r^{1-n} \int_{T_r} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx = J'(r). \quad (2.2)$$

Доказательство. Положим $t = r^{2-n}$. Тогда

$$\begin{aligned} Lu^2 &= \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u^2}{\partial x_j} \right) = 2 \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) u \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = \\ &= 2 \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) u + 2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} = 2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j}. \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\Gamma - t)_+ L(u^2) dx &= 2 \int_{\Omega} (\Gamma - t)_+ \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx, \\ \int_{\Omega} (\Gamma - t)_+ L(u^2) dx &= \int_{T_r} (\Gamma - t)_+ L(u^2) dx. \end{aligned}$$

Пусть

$$I = \int_{T_r} (\Gamma - t) L(u^2) dx = \int_{T_r} (\Gamma - t) \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u^2}{\partial x_j} \right) dx.$$

Обозначим

$$w_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u^2}{\partial x_j}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Тогда

$$\begin{aligned} I &= \sum_{i=1}^n \int_{T_r} (\Gamma - t) \frac{\partial}{\partial x_i} w_i dx = \sum_{i=1}^n \int_{T_r} \left[(\Gamma - t) \frac{\partial w_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} w_i \right] dx - \\ &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{T_r} \frac{\partial}{\partial x_i} ((\Gamma - t) w_i) dx. \end{aligned}$$

Обозначим через $\bar{w} = ((\Gamma - t)w_1, (\Gamma - t)w_2, \dots, (\Gamma - t)w_n)$. Тогда $i_1 = \int_{T_r} \operatorname{div} \hat{w} dx = \int_{\partial T_r} (\hat{w}, \hat{n}) ds = 0$, $\hat{w}/\partial T_r = 0$ (т. к. $\Gamma - t = 0$ на ∂T_r).

Тогда

$$\begin{aligned} I &= - \sum_{i=1}^n \int_{T_r} \frac{\partial}{\partial x_i} w_i dx = - \sum_{i,j=1}^n \int_{T_r} a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial u^2}{\partial x_j} dx = \\ &= - \sum_{j=1}^n \int_{T_r} \sum_{i=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial u^2}{\partial x_j} dx. \end{aligned}$$

Обозначим $z_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i}$, $j = 1, 2, \dots, n$.

Тогда

$$\begin{aligned} I &= - \sum_{j=1}^n \int_{T_r} z_j \frac{\partial u^2}{\partial x_j} dx = - \sum_{j=1}^n \int_{T_r} \left(\frac{\partial z_j}{\partial x_j} u^2 + z_j \frac{\partial u^2}{\partial x_j} \right) dx + \\ &\quad + \sum_{j=1}^n \int_{T_r} \frac{\partial z_j}{\partial x_j} u^2 dx = j_1 + j_2 \end{aligned}$$

Пусть $\hat{z} = (u^2 z_1, u^2 z_2, \dots, u^2 z_n)$. Тогда

$$\begin{aligned} j_1 &= - \sum_{j=1}^n \int_{T_r} \frac{\partial}{\partial x_j} (u^2 z_j) dx = - \int_{T_r} \operatorname{div} \hat{z} dx = - \int_{\partial T_r} (\hat{z}, \hat{n}) ds = \\ &= - \sum_{j=1}^n \int_{\partial T_r} u^2 z_j n_j ds = - \sum_{j=1}^n \int_{\partial T_r} u^2 \sum_{i=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j} n_j ds = - \sum_{i,j=1}^n \int_{\partial T_r} u^2 a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} j_2 &= \sum_{j=1}^n \int_{T_r} \frac{\partial z_j}{\partial x_j} u^2 dx = \sum_{j=1}^n \int_{T_r} u^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \right) dx = \\ &= \int_{T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \right) dx = \int_{T_r} u^2 L \Gamma dx, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где $\Gamma(x)$ — фундаментальное решение, т. е.

$$L \Gamma(x) = -\delta(x).$$

Другими словами,

$$\int_{T_r} \varphi(x) L\Gamma(x) dx = -\varphi(0),$$

$j_2 = -u^2(0)$ на $0 \in \partial\Omega$, поэтому $j_2 = 0$ и из (2.4) заключаем

$$\begin{aligned} I &= - \sum_{i,j=1}^n \int_{\partial T_r} u^2 a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds, \\ \frac{2}{2-n} \int_{T_r} (\Gamma - t) \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx &= -\frac{1}{2-n} \int_{\partial T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds, \\ \frac{2}{2-n} \int_{T_r} (\Gamma - t) \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx &= J(r), \\ J'(r) &= \frac{2}{n-2} \frac{\partial}{\partial r} \int_0^r dy \int_{\partial T_y} (\Gamma - r^{2-n}) \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} ds_y = \\ &= 2r^{1-n} \int_{T_r} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx. \end{aligned}$$

Лемма 1 доказана.

Лемма 2. При $\lambda_1 r < \delta$ справедливо неравенство

$$J(r) \leq CM_r(u). \quad (2.5)$$

Доказательство. Заметим, что на ∂T_r

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j &= - \sum_{i,j=1}^n a_{ij} n_i n_j |\nabla \Gamma| \leq 0, \\ \int_{T_r} L\Gamma dx &= \int_{\partial T_r} \frac{\partial \Gamma}{\partial \nu} ds \quad \left(\frac{\partial}{\partial \nu} - \text{производная по конормали} \right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Знаем, что $L\Gamma(x) = -\delta(x)$.

По определению $\frac{\partial \Gamma}{\partial \nu} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j$,

$$\begin{aligned} \int_{T_r} L\Gamma dx &= - \int_{T_r} \delta(x) dx = -1. \\ \int_{T_r} L\Gamma dx &= \int_{\partial T_r} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds = -1. \end{aligned}$$

Тогда

$$J(r) = -\frac{1}{n-2} \int_{\partial T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds.$$

Из принципа максимума следует

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n-2} \int_{T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds &\leq -\frac{1}{n-2} \max_{\partial T_r} u^2 \int_{\partial T_r} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j ds = \\ &= \frac{1}{n-2} \max_{T_r} u^2 \leq \frac{1}{n-2} \max_{S_r(2\lambda_1)^{-1}} u^2 = \frac{1}{n-2} \max_{\partial S_r(2\lambda_1)^{-1}} u^2 \leq \\ &\leq \frac{1}{n-2} \max_{\partial S_r(2\lambda_1)^{-1} \cup \partial S_r(2\lambda_1)} u^2 = \frac{1}{n-2} \max_{K_r\left(\frac{1}{2\lambda_1}, 2\lambda_1\right)} u^2 \leq \frac{C}{n-2} M_r(u). \end{aligned}$$

В результате получим

$$\max_{K_r\left(\frac{1}{2\lambda_1}, 2\lambda_1\right)} u^2 \leq CM_r(u). \quad (2.7)$$

Неравенство (2.5) доказано.

Лемма 3. При $r < R < \delta$ справедливо неравенство

$$J(r) \leq C J(R) \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right). \quad (2.8)$$

Доказательство. В силу леммы 1, учитывая (1.4)

$$J'(r) \geq 2\mu r^{1-n} \int_{T_r} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx \geq C r^{1-n} \int_{S_r(\lambda_1)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx. \quad (2.9)$$

Из леммы 2 и оценки (2.8) имеем

$$J'(r) \geq C r^{1-n} \frac{C_1 \text{cap}_\lambda(C_r(\lambda_1^3))}{r^n \prod_{i=1}^n r^{\alpha_i/2}} \int_{K_r(\lambda_1 \lambda_1^3)} u^2 dx \geq C \frac{J(\alpha^2 r)}{r} \gamma(\alpha^3 r).$$

С другой стороны,

$$\frac{J'(r)}{J(\alpha^2 r)} \geq C \frac{\gamma(\alpha^3 r)}{r}.$$

Интегрируя от r до R , получаем

$$\ln \frac{J(R)}{J(r)} \geq C \int_r^R \frac{\gamma(\rho)}{\rho} d\rho.$$

Отсюда, используя оценку $\gamma(\rho) \leq 1$ и монотонность $J(r)$, получаем неравенство (2.7). Лемма доказана.

Лемма 4. Пусть $R < \delta$ и $r \leq \alpha^2 R$, где α — постоянная из (1.4). Тогда справедливо неравенство

$$\int_{S_r(\alpha)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx \leq C J(R) r^{n-2} \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right). \quad (2.10)$$

Доказательство. В силу леммы 1 и (1.4)

$$J'(r) \geq C r^{1-n} \int_{S_r(\alpha)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx.$$

Интегрируя от αr до r

$$\begin{aligned} \int_{\alpha r}^r J'(\rho) d\rho &\geq C \int_{\alpha r}^r \rho^{1-n} \int_{S_\rho(\alpha)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx d\rho \geq \\ &\geq C r^{2-n} \int_{S_r(\alpha^2)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx, \end{aligned}$$

получим

$$J(r) \geq C r^{2-n} \int_{S_r(\alpha)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 dx.$$

Теперь (2.10) следует из неравенства (2.8).

3. Оценки убывающего решения

Основной целью этого параграфа является доказательство следующего утверждения.

Теорема 1. Пусть функция $u(x) \in W_{2,\Lambda}^1(S_\delta(k))$ удовлетворяет уравнению $Lu = 0$ в $\Omega \cap S_\delta(k)$ и равна нулю на $C_\delta(k)$. Тогда $R < \alpha\delta$, $r < \alpha^5 R$ и справедлива оценка

$$\max_{S_r''(\alpha)} |u| \leq C M_R^{1/2}(u) \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right). \quad (3.1)$$

Доказательство. Применяя формулу А.С. Кронрода [11; 12], получим

$$\int_\Omega F(x) |\nabla u| dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{u=t} F(x) dS_x,$$

где $F(x)$ — измеримая по Борелю функция, а функция $u(x)$ удовлетворяет условию Липшица, получаем

$$A = \int_{Q_r(\frac{1}{\alpha^2}, \alpha^2)} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\Gamma(x)=t} u^2 |\nabla \Gamma| \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}}{|\nabla \Gamma| |\nabla \Gamma|} dS_x =$$

$$= (2 - n) \int_{a^{2r}}^{a^{-2r}} \tau^{1-n} d\tau \int_{\partial T_r} u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} n_j dS_x,$$

$$A \equiv \int_{a^{2r}}^{a^{-2r}} J(\tau) \tau^{1-n} d\tau.$$

Применяя лемму 3, приходим к неравенству

$$A \leq CJ(R)r^{2-n} \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right).$$

В силу леммы 4 та же оценка верна для интеграла

$$B \equiv \int_{Q_r(\frac{1}{\alpha^2}, \alpha^2)} \left[\Gamma - (\alpha^{-2}r)^{2-n} \right]^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} dx.$$

Поэтому, полагая $v = u \left[\Gamma - (\alpha^{-2}r)^{2-n} \right]_+$ и

$$N \equiv \int_{CT_{\alpha^2}} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial v}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_j} dx,$$

$$2u\Gamma_+ \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j} \leq 2 \sqrt{\Gamma_+^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j}} \sqrt{u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}} \leq$$

$$\leq \Gamma_+^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} + u^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j},$$

получим

$$N \equiv \int_{CT_{\alpha^2}} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial v}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_j} dx \leq 2(A + B) \leq Cr^{2-n} J(R) \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right). \quad (3.2)$$

С другой стороны, так как $v = 0$ вне $S_r(\frac{1}{\alpha^3})$, то

$$N \geq C \int_{K_r(\frac{1}{\alpha^3}, \alpha)} \sum_{i=1}^n \lambda_i(x) \left(\frac{\partial v}{\partial x_i} \right)^2 dx \geq Cr^{-2} \int_{K_r(\frac{1}{\alpha^3}, \alpha)} v^2 dx \geq Cr^{2-n} M_r(u). \quad (3.3)$$

В силу принципа максимума и неравенства (2.6) из (3.1) и (3.2) следует

$$\max_{S_r(a)} u^2 \leq \max_{\partial T_r} u^2 \leq CM_r(u) \leq CJ(R) \exp \left(-C \int_r^R \gamma(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right). \quad (3.4)$$

Заметим наконец, что в силу леммы 2 справедливо неравенство $J(R) \leq CM_R(u)$, которое вместе с (3.3) и доказывает теорему.

Литература

- [1] Мазья В.Г. О регулярности на границе решений эллиптических уравнений и конформного отображения // Доклады Академии наук СССР. 1963. Т. 152, № 6. С. 1297–1300. URL: <https://www.mathnet.ru/rus/dan28720>.
- [2] Мазья В.Г. О модуле непрерывности решения задачи Дирихле вблизи нерегулярной границы // Проблемы математического анализа. Ленинград, 1966. С. 45–58.
- [3] De Giorgi E. Sulla differenziabilita e l'analiticita delle estremali degli intergrali multipli regolari // Mem. Acad. Sci. Torino. 1957. Vol. 3, no. 1, pp. 25–43. URL: <https://zbmath.org/0084.31901>.
- [4] Nash J. Continuity of solutions of parabolic and elliptic equations // American Journal of Mathematics. 1958. Vol. 80, No. 4, Pp. 931–954. DOI: <https://doi.org/10.2307/2372841>.
- [5] Morrey C.B. Second order elliptic equations in several variables and Holder continuity // Mathematische Zeitschrift. 1959. Vol. 72. Pp. 146–164. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01162944>.
- [6] Уральцев Н.Н. О регулярности решений многомерных эллиптических уравнений и вариационных задач // Доклады Академии наук СССР. 1960. Т. 130, № 6. С. 1206–1209.
- [7] Stampacchia G. Problemi al contorno ellittici, con dati discontinui, dotati di soluzioni holderiane // Annali di Matematica Pura ed Applicata. 1960. Vol. 51. Pp. 1–37. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02410941>.

- [8] Moser J. A new proof of De Giorgi's theorem concerning the regularity problem for elliptic differential equations // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1960. Vol. 13, Issue 3, Pp. 457–468. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160130308>.
- [9] Moser J. On Harnack's theorem for elliptic differential equations // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1961. Vol. 14, Issue 3. Pp. 577–591. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160140329>.
- [10] Litman W., Stampacchia G., Weinberger H.F. Regular points for elliptic equations with discontinuous coefficients // Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa – Classe de Scienze. 1963. Serie 3, Vol. 17, no. 1–2, pp. 43–77. DOI: http://www.numdam.org/item/ASNSP_1963_3_17_1-2_43_0.
- [11] Royden H. The growth of a fundamental solution of an elliptic divergence structure equation // Studies in Mathematical Analysis and Related Topics. 1962. Pp. 333–340. URL: <https://zbmath.org/0152.31101>.
- [12] Алхутов Ю.А. О регулярности граничных точек относительно задачи Дирихле для эллиптических уравнений второго порядка // Матем. заметки. 1981. Т. 30, Вып. 3. С. 333–342. URL: <https://www.mathnet.ru/rus/mzm6197>.
- [13] Мазья В.Г. О поведении вблизи границы решения задачи Дирихле для эллиптического уравнения второго порядка в дивергентной форме // Матем. заметки. 1967. Т. 2, Вып. 2. С. 209–220. URL: <https://www.mathnet.ru/rus/mzm5480>.
- [14] Guseynov S.T. The regularity test of boundary point for non-uniformly degenerating second order elliptic equations // Proceedings of IMM of Azerbaijan AS, 1999. Vol. XI. P. 65–77. URL: https://www.imm.az/journals/RMI_eserleri/cild11_N19_1999/meqaleler/65-77.pdf.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-23-30

Submitted: 15.01.2024

Revised: 19.02.2024

Accepted: 28.02.2024

S.T. Huseynov

Baku State University, Baku, Republic of Azerbaijan

E-mail: sarvanhuseynov@rambler.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-7473-2269>

M.J. Aliyev

Baku State University, Baku, Republic of Azerbaijan

E-mail: a.mushfiq@rambler.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9084-6251>

SOME AUXILIARY ESTIMATES FOR SOLUTIONS TO NON-UNIFORMLY DEGENERATE SECOND-ORDER ELLIPTIC EQUATIONS

ABSTRACT

We consider a class of second order elliptic equations in divergence form with non-uniform exponential degeneracy. The method used is based on the fact that the degeneracy rates of the eigenvalues of the matrix $\|a_{ij}(x)\|$ (function $\lambda_i(x)$) are not the functions of unusual norm $|x|$, but of some anisotropic distance $|x|_{a-}$. We assume that the Dirichlet problem for such equations is solvable in the classical sense for every continuous boundary function in any normal domain Ω .

Estimates for the weak solutions of Dirichlet problem near the boundary point are obtained, and Green's functions for second order non-uniformly degenerate elliptic equations are constructed.

Key words: uniform ellipticity; non-uniform degeneration spaces; fundamental solution.

Citation. Huseynov S.T., Aliyev M.J. Some auxiliary estimates for solutions to non-uniformly degenerate second-order elliptic equations. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 23–30. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-23-30>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Huseynov S.T., Aliyev M.J., 2024

Sarvan T. Huseynov — Doctor of Mathematical Sciences, associate professor at the Department of Higher Mathematics, Baku State University, 23, Khalilov Street, Baku, AZ 1148, Republic of Azerbaijan.

Mushfiq J. Aliyev — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, associate professor at the Department of Higher Mathematics, Baku State University, 23, Khalilov Street, Baku, AZ 1148, Republic of Azerbaijan.

References

- [1] Mazya V.G. Regularity at the boundary of solutions of elliptic equations and conformal mapping. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 1963, vol. 152, number 6, pp. 1297–1300. Available at: <https://www.mathnet.ru/rus/dan28720>. (In Russ.)
- [2] Mazya V.G. On modulus of continuity of the solution to the Dirichlet problem near regular boundary // *Problems of Mathematical Analysis*. Leningrad, 1966, pp. 45–58. (In Russ.)
- [3] De Giorgi E. Sulla differenziabilita e l'analiticita delle estremali degli intergrali multipli regolari. *Mem. Acad. Sci. Torino*, 1957. vol. 3, no. 1, pp. 25–43. Available at: <https://zbmath.org/0084.31901>. (In Italian)
- [4] Nash J. Continuity of solutions of parabolic and elliptic equations. *American Journal of Mathematics*, 1958, vol. 80, no. 4, pp. 931–954. DOI: <https://doi.org/10.2307/2372841>.
- [5] Morrey C.B. Second order elliptic equations in several variables and Holder continuity. *Mathematische Zeitschrift*, 1959, vol. 72, pp. 146–164. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01162944>.
- [6] Uraltseva N.N. On regularity of solutions of multidimensional elliptic equations and variational problems. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 1960, vol. 130, no. 6, pp. 1206–1209. (In Russ.)
- [7] Stampacchia G. Problemi al contorno ellittici, con dati discontinui, dotati di soluzioni holderiane. *Annali di Matematica Pura ed Applicata*, 1960, vol. 51, pp. 1–37. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02410941>.
- [8] Moser J. A new proof of De Giorgi's theorem concerning the regularity problem for elliptic differential equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1960, vol. 13, issue 3, pp. 457–468. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160130308>.
- [9] Moser J. On Harnack's theorem for elliptic differential equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1961, vol. 14, issue 3, pp. 577–591. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160140329>.
- [10] Litman W., Stampacchia G., Weinberger H.F. Regular points for elliptic equations with discontinuous coefficients. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa — Classe de Scienze*, 1963, serie 3, vol. 17, no. 1–2, pp. 43–77. DOI: http://www.numdam.org/item/ASNSP_1963_3_17_1-2_43_0.
- [11] Royden H. The growth of a fundamental solution of an elliptic divergence structure equation. *Studies in Mathematical Analysis and Related Topics*, 1962, pp. 333–340. URL: <https://zbmath.org/0152.31101>.
- [12] Alkhutov Yu.A. Regularity of boundary points relative to the Dirichlet problem for second-order elliptic equations. *Mathematical Notes*, 1981, vol. 30, issue 3, pp. 333–342. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01141620>. (In English; original in Russian)
- [13] Maz'ya V.G. Behavior, near the boundary, of solutions of the Dirichlet problem for a second order elliptic equations in divergent form. *Mathematical Notes*, 1967, vol. 2, issue 2, pp. 610–617. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01094255>. (In English; original in Russian)
- [14] Guseynov S.T. The regularity test of boundary point for non-uniformly degenerating second order elliptic equations. *Proceedings of IMM of Azerbaijan AS*, 1999, vol. XI, pp. 65–77. Available at: https://www.imm.az/journals/RMI_eserleri/cild11_N19_1999/meqaleler/65-77.pdf.



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-31-39

УДК 517.928

Дата: поступления статьи: 15.12.2023
после рецензирования: 17.01.2024
принятия статьи: 15.05.2024

А.С. Кирсанова

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: askirsanova99@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-1799-1423>

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ В МОДЕЛИ ВЕТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ УСТАНОВКИ ДАРЬЕ

АННОТАЦИЯ

В статье рассматривается математическая модель малой ветроэнергетической установки Дарье. Данная установка представляет собой тип ветряной турбины с вертикальной осью, названной в честь ее изобретателя Жоржа Жана Мари Дарье. Конструкция представляет собой вертикально ориентированный вал с прикрепленными к нему изогнутыми лопастями или аэродинамическими профилями, образующими форму, похожую на венчик для яиц. В современном мире ветроэнергетика выступает как важнейший столп перехода к возобновляемым источникам энергии. Эта технология содействует снижению выбросов углерода и смягчению воздействия человечества на окружающую среду. В данном контексте ветроэнергетика превращается не только в средство снабжения электроэнергией, но и в мощный катализатор для построения более экологически устойчивого и энергоэффективного будущего. Исследуется уравнение стационарных режимов при значении внешнего сопротивления динамической модели, заданного простейшим уравнением. Найдены условия, при которых в системе наблюдаются релаксационные колебания.

Ключевые слова: математическое моделирование; динамические модели; ветроэнергетическая установка; аппроксимация функции; релаксационные колебания; сингулярные возмущения; инвариантные многообразия; дифференциальные уравнения.

Цитирование. Кирсанова А.С. Релаксационные колебания в модели ветроэнергетической установки Дарье // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 31–39. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-31-39>.

Информация о конфликте интересов: автор и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Кирсанова А.С., 2024

Алена Сергеевна Кирсанова — аспирант кафедры дифференциальных уравнений и теории управления, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

1. Предварительные сведения

В данной статье проводится математическое моделирование колебаний ветроэнергетической установки Дарье (ВЭУ). В статьях [1–6] рассматривалась математическая модель ветрогенератора, состоящая из двух уравнений. В [1; 2] были предложены новые типы конструкции ветроэнергетической установки (рис 1.1.). Исследуются движения электромеханической системы, моделирующей стационарные режимы генератора с ветротурбинным движителем с помощью качественных методов теоретической механики в

статьях [3–5]. Рассмотрены вопросы существования и устойчивости установившихся режимов и описаны области их притяжения [3–5]. Анализ критических режимов, основанный на использовании техники траекторий уток, был проведен в [7]. В работе [6] исследовано уравнение стационарных режимов при различных значениях внешнего сопротивления динамической модели. Также описаны различные аспекты конструктивной теории малых ветроэлектростанций [8; 9]. Математическая модель малой ветроэнергетической установки Дарье представляет собой трехтемповую дифференциальную систему:

$$\begin{aligned} J\dot{\Omega} &= -kI + M(\Omega), \\ LI\dot{I} &= k\Omega - (R + r)I, \\ \dot{R} &= \varepsilon F(\Omega, I, R), \end{aligned} \quad (1.1)$$

где J — момент инерции турбины, L — индуктивность якоря, I — сила тока в обмотке якоря, Ω — коэффициент быстроходности, R — внешнее сопротивление, M — относительный момент аэродинамических сил. Параметр k — коэффициент электромеханического взаимодействия, r — малое внутреннее сопротивление якоря. Точка означает производную по времени t . График экспериментальных данных на рис. 2.1 задает функцию $M(\Omega)$ [3]. Величины L и ε рассматриваются как малые параметры. Это означает, что в данной системе переменная I является самой быстрой, R — самой медленной из трех переменных.



Рис. 1.1. Ветрогенератор Дарье
 Fig. 1.1. Wind turbine Darrieus

2. Основные результаты

2.1. Аппроксимация функции $M(\Omega)$

Рассмотрим график экспериментальных данных $M(\Omega)$, изображенный на рис. 2.1. Относительный момент аэродинамических сил и коэффициент быстроходности на рис. 2.1 являются безразмерными ($M = \frac{M_a}{0,5\rho S b V^2}$, $\Omega = \frac{b\omega}{V}$, где ω — угловая скорость, b — расстояние от эффективного давления лопастей для оси вращения, V — скорость воздуха, M_a — момент аэродинамических сил, ρ — плотность воздуха, S — площадь лопастей) [3; 5; 7]. Для построения функции $M(\Omega)$ зададим ее как кусочно-линейную функцию по промежуткам:

$$\Omega \in [0; 0.86]; [0.86; 1.8]; [1.8; 4]; [4; 8.64]$$

и аппроксимируем на каждом из участков отдельно.

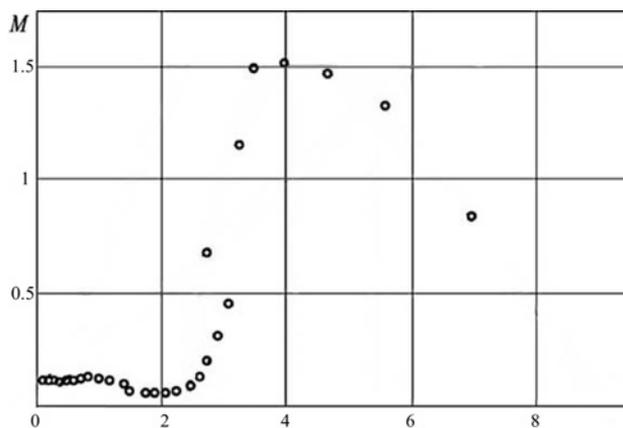


Рис. 2.1. Экспериментальные данные
 Fig. 2.1. Experimental data

В результате получается следующее задание функции $M(\Omega)$:

$$M(\Omega) = \begin{cases} 0.02906976745 \Omega + 0.12, & \text{где } \Omega \in [0; 0.86]; \\ -0.0638297872 \Omega + 0.199893617, & \text{где } \Omega \in [0.86; 1.8]; \\ 0.643181818 \Omega - 1.0727272725, & \text{где } \Omega \in [1.8; 4]; \\ -0.28556034485 \Omega + 2.6422413795, & \text{где } \Omega \in [4; 8.64]. \end{cases} \quad (2.1)$$

Рисунок 2.2 показывает график функции $M(\Omega)$, заданной (2.1).

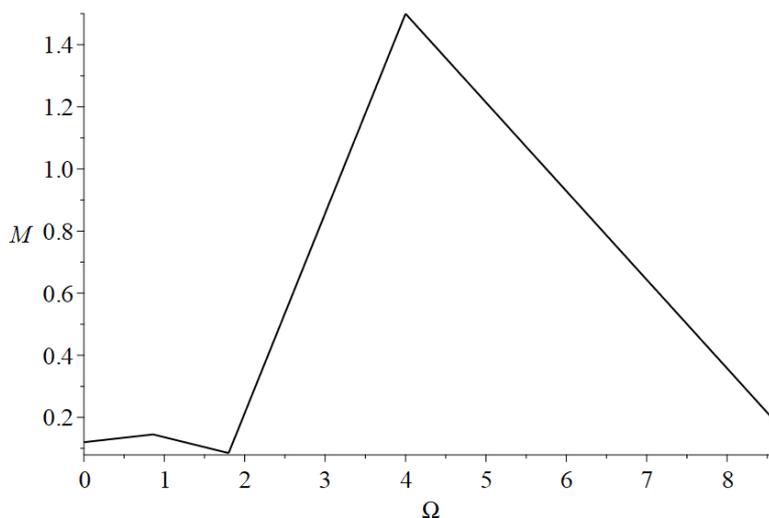


Рис. 2.2. График функции $M(\Omega)$, заданной (2.1)
 Fig. 2.2. Graph of the function $M(\Omega)$, given by (2.1)

В данном случае применяется достаточно грубая аппроксимация, однако важно отметить, что более точная аппроксимация относительного момента аэродинамических сил не влияет существенным образом на качественное поведение решений дифференциальной системы.

2.2. Медленная кривая

Система (1.1) является сингулярно возмущенной, так как малый параметр L умножается на производную силы тока. Система (1.1) имеет двумерное инвариантное многообразие [7; 10; 11]

$$I = h(\Omega, I, R). \quad (2.2)$$

Функция h может быть найдена из уравнения инвариантности

$$L \frac{\partial h}{\partial R} \varepsilon F(\Omega, I, R) + L \frac{\partial h}{\partial \Omega} \frac{1}{J} (-kh + M(\Omega)) = k\Omega - (R + r)h. \quad (2.3)$$

Пренебрегая членами порядка $O(L)$, получается

$$h = \frac{k\Omega}{R + r}. \quad (2.4)$$

Движение по инвариантному многообразию описывается дифференциальной системой, где $k = 0.5, r = 0.1, J = 1$:

$$\begin{aligned} J\dot{\Omega} &= -\frac{k^2\Omega}{R+r} + M(\Omega), \\ \dot{R} &= \varepsilon F(\Omega, I, R). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Полученная система является быстро-медленной, так как правая часть уравнения для медленной переменной R умножается на малый параметр ε . В связи с этим мы можем использовать аппарат теории релаксационных колебаний для анализа этой системы [12; 13]. Медленная кривая системы (2.5) задается уравнением:

$$-\frac{k^2\Omega}{R+r} + M(\Omega) = 0. \quad (2.6)$$

Из (2.6) получим уравнение медленной кривой в явной форме, для этого выразим $R(\Omega)$:

$$R = R(\Omega) = \frac{k^2\Omega}{M(\Omega)} - r. \quad (2.7)$$

График медленной кривой представлен на рис. 2.3, при $k = 0.5, r = 0.1, J = 1$.

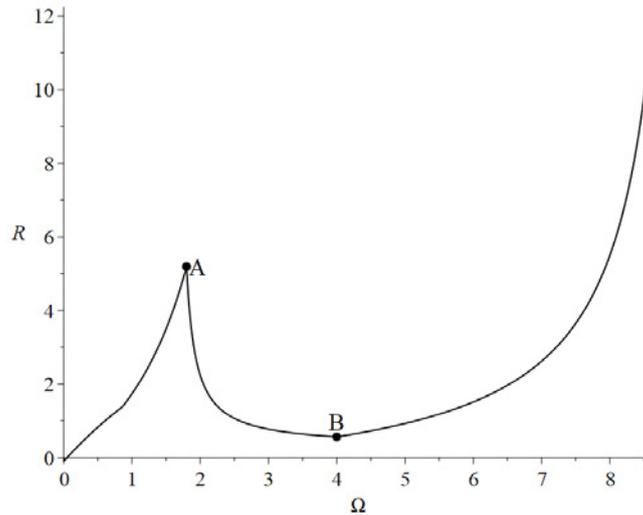


Рис. 2.3. Графики медленной кривой
 Fig. 2.3. Slow curve charts

Для исследования устойчивости медленной кривой (2.6) необходимо найти производную функции $R(\Omega)$ на каждом из промежутков отдельно:

$$\frac{\partial R(\Omega)}{\partial \Omega} = \frac{k^2 M(\Omega) - M'(\Omega) k^2 \Omega}{M^2(\Omega)}. \quad (2.8)$$

На первом участке медленной кривой при $\Omega \in [0; 0.86]$: пусть $\Omega = 0.5, R = 0.8291270529$, тогда $\frac{\partial R(\Omega)}{\partial \Omega}(0.5; 0.8291270529) = -0.2400000001 < 0$, следовательно, участок является устойчивым.

На втором участке медленной кривой при $\Omega \in [0.86; 1.8]$: пусть $\Omega = 1, R = 1.737373042$, тогда $\frac{\partial R(\Omega)}{\partial \Omega}(1; 1.737373042) = -0.1998936100 < 0$, следовательно, участок является устойчивым.

На третьем участке медленной кривой при $\Omega \in [1.8; 4]$: пусть $\Omega = 3, R = 0.77533156489$, тогда $\frac{\partial R(\Omega)}{\partial \Omega}(3; 0.77533156489) = 0.3575757572 > 0$, следовательно, участок является неустойчивым.

На четвертом участке медленной кривой при $\Omega \in [4; 8.64]$: пусть $\Omega = 6, R = 1.514849187$, тогда $\frac{\partial R(\Omega)}{\partial \Omega}(6; 1.514849187) = -0.4403735633 < 0$, следовательно, участок является устойчивым.

В результате устойчивыми участками медленной кривой являются промежутки:

$$\Omega \in [0; 0.86]; [0.86; 1.8]; [4; 8.64],$$

а неустойчивым участком:

$$\Omega \in [1.8; 4].$$

Точками срыва являются точки экстремумов медленной кривой, следовательно, исходя из рис. 2.3 имеются две точки срыва с координатами: $A(1.8; 5.194117653)$ и $B(4; 0.5666666669)$. Точки A и B являются точками смены устойчивости (рис. 2.3).

2.3. Релаксационные колебания

Пусть $F(\Omega, I, R) = \varepsilon(\alpha - \Omega)$. Тогда система уравнений (2.5) будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} J\dot{\Omega} &= -\frac{k^2\Omega}{R+r} + M(\Omega), \\ \dot{R} &= \varepsilon(\alpha - \Omega). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Зададим точку (Ω_*, R_*) как положение равновесия системы уравнений (2.9):

$$\begin{aligned} -\frac{k^2\Omega_*}{R_*+r} + M(\Omega_*) &= 0, \\ \varepsilon(\alpha - \Omega_*) &= 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Выполнив преобразования, получим координаты положения равновесия:

$$\begin{aligned} \Omega_* &= \alpha, \\ R_* &= \frac{k^2\Omega_*}{M(\Omega_*)} - r. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Исследуем на устойчивость положения равновесия при различных значениях параметра α .

Матрица Якоби системы (2.9) в общем виде будет выглядеть следующим образом:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \Omega} & \frac{\partial f}{\partial R} \\ \frac{\partial g}{\partial \Omega} & \frac{\partial g}{\partial R} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Рассмотрим 3 случая, когда положение равновесия находится на:

- 1) на первом устойчивом участке медленной кривой при $\Omega \in [0; 1.8]$;
- 2) на втором устойчивом участке медленной кривой при $\Omega \in [4; 8.64]$;
- 3) на неустойчивом участке медленной кривой при $\Omega \in [1.8; 4]$.

Рассмотрим первый случай. Так как момент аэродинамических сил задается кусочно-линейным образом и $\Omega \in [0; 1.8]$, то возьмем уравнение момента аэродинамических сил для второго участка.

Матрица Якоби в точке $(\alpha, \frac{k^2\alpha}{\alpha} - r)$, при $\Omega \in [0.86; 1.8], k = 0.5, r = 0.1, J = 1$:

$$A|_{(\alpha, \frac{k^2\alpha}{\alpha} - r)} = \begin{pmatrix} \frac{0.199893617 - 0.0638297872\alpha}{\alpha} - 0.0638297872 & \frac{(0.199893617 - 0.0638297872\alpha)^2}{k^2\alpha} \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Характеристическое уравнение будет равно:

$$\lambda^2 + \left(\frac{0.19989361700}{\alpha}\right)\lambda + 0.016296966936\alpha - 0.10207333629 + \frac{0.15982983247}{\alpha} = 0. \quad (2.14)$$

Найдем дискриминант и корни уравнения (2.14) при $\alpha = 1$:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -0.099946808500 - 0.25310886707i; \\ \lambda_2 &= -0.099946808500 + 0.25310886707i. \end{aligned} \quad (2.15)$$

При полученных собственных значениях положение равновесия является асимптотически устойчивым фокусом (рис. 2.4).

Рассмотрим второй случай. Так как момент аэродинамических сил задается кусочно-линейным образом и $\Omega \in [4; 8.64]$, то возьмем уравнение момента аэродинамических сил для четвертого участка.

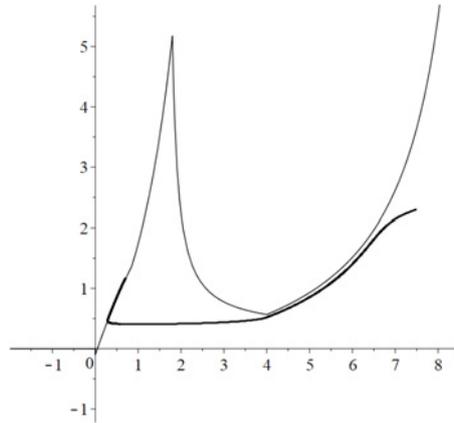


Рис. 2.4. Медленная кривая (тонкая линия) и траектория системы (жирная линия) при $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 1$; начальная точка: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Fig. 2.4. Slow curve (thin line) and system trajectory (thick line) at $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 1$; starting point: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Действуя аналогичным образом, как и в предыдущем случае, находим корни характеристического уравнения при $\alpha = 4.5$:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -0.29358237550 - 1.2454650976i; \\ \lambda_2 &= -0.29358237550 + 1.2454650976i. \end{aligned} \quad (2.16)$$

При полученных собственных значениях положение равновесия является асимптотически устойчивым фокусом (рис. 2.5).

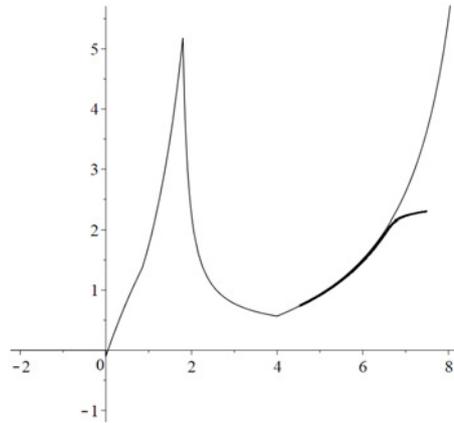


Рис. 2.5. Медленная кривая (тонкая линия) и траектория системы (жирная линия) при $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 4.5$; начальная точка: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Fig. 2.5. Slow curve (thin line) and system trajectory (thick line) at $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 4.5$; starting point: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Наконец, рассмотрим третий случай. Так как момент аэродинамических сил задается кусочно-линейным образом и $\Omega \in [4; 8.64]$, то возьмем уравнение момента аэродинамических сил для третьего участка. Действуя аналогичным образом, находим корни характеристического уравнения при $\alpha = 3$:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0.17878787875 - 0.97308003575i; \\ \lambda_2 &= 0.17878787875 + 0.97308003575i. \end{aligned} \quad (2.17)$$

При полученных собственных значениях положение равновесия находится на неустойчивом участке медленной кривой и является неустойчивым фокусом. В этом случае в системе наблюдается релаксационный цикл (рис. 2.6). При этом траектория сначала движется вдоль устойчивого участка медленной кривой, далее особая точка проходит точку экстремума (точку срыва) и при этом теряет устойчивость, что соответствует бифуркации Андронова — Хопфа, т. е. при прохождении параметра α через бифуркационное значение устойчивое положение равновесия дифференциальной системы становится неустойчивым. Далее срывается и переходит в ε -окрестность другого устойчивого участка, следует вдоль него до второй точки срыва, после которого возвращается на первый устойчивый участок (рис. 2.6) [12].

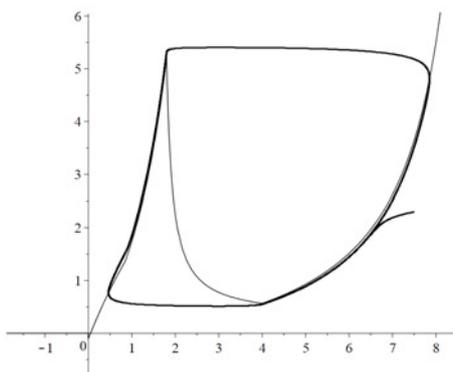


Рис. 2.6. Медленная кривая (тонкая линия) и предельный цикл (жирная линия) при $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 3$; начальная точка: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Fig. 2.6. Slow curve (thin line) and limit cycle (thick line) at $\varepsilon = 0.01; k = 0.5; r = 0.1; J = 1; \alpha = 3$; starting point: $\Omega(0) = 7.5, R(0) = 2.3$

Суммируем вышесказанное. В зависимости от изменения значения параметра α особая точка меняет свое положение на медленной кривой. Если положение равновесия лежит на устойчивой части медленной кривой, то оно является асимптотически устойчивым. С физической точки зрения такая ситуация представляется предпочтительной, поскольку соответствует стационарному режиму работы системы. Случай, когда положение равновесия находится на неустойчивом участке и возникает релаксационный цикл, представляется неприемлемым с физической точки зрения, так как в системе возникают колебания с достаточно большой амплитудой.

Выводы

Рассмотрена трехмерная математическая модель ветрогенератора Дарье. При кусочно-линейной аппроксимации аэродинамического момента найдены условия возникновения режимов работы ветрогенератора, соответствующие релаксационным колебаниям.

Литература

- [1] Климина Л.А., Досаев М.З., Селюцкий Ю.Д. О динамике ветроэнергетической установки с рабочим элементом на основе механизма антипараллелограмма // Мехатроника, автоматизация, управление. 2016. Т. 17, № 8. С. 536–540. DOI: <https://doi.org/10.17587/mau.17.536-540>. EDN: <https://www.elibrary.ru/whtppl>.
- [2] Андронов П.Р., Досаев М.З., Дынникова Г.Я., Селюцкий Ю.Д., Стрекалов С.Д. Моделирование ветродвигателя колебательного типа // Проблема машиностроения и надёжности машин. 2009. № 4. С. 86–91. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=12806991>. EDN: <https://www.elibrary.ru/kugqnt>.
- [3] Досаев М.З., Линь Ч.Х., Лю В.Л., Самсонов В.А., Селюцкий Ю.Д. Качественный анализ стационарных режимов малых ветровых электростанций // Прикладная математика и механика. 2009. Т. 73, № 3. С. 368–374. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=12242530>. EDN: <https://www.elibrary.ru/khxmj>.
- [4] Досаев М.З., Самсонов В.А., Селюцкий Ю.Д. О динамике малой ветроэлектростанции // Доклады академии наук. 2007. Т. 416, № 1. С. 50–53. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9533786>. EDN: <https://www.elibrary.ru/iaqiit>.
- [5] Досаев М.З., Самсонов В.А., Селюцкий Ю.Д., Лю В.Л., Линь Ч.Х. Бифуркации режима функционирования малых ветроэлектростанций и оптимизации их характеристик // Известия Российской академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 2009. № 2. С. 59–66. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=13064268>. EDN: <https://www.elibrary.ru/kzxakl>.
- [6] Кирсанова А.С. Бифуркации стационарных режимов в модели ветроэнергетической установки // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2021. Т. 27, № 4. С. 92–98. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-92-98>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tcezeg>.
- [7] Kirsanova A. Critical Phenomena in the Darrieus Wind Turbine Model // 2023. 16th International Conference Management of large-scale system development (MLSD). Moscow, Russian Federation: IEEE, 2023, pp. 1–4. DOI: <http://doi.org/10.1109/MLSD58227.2023.10304042>.

- [8] Кобрин А.И., Досаев М.З., Локшин Б.Я., Самсонов В.А., Селюцкий С.Ю. Конструктивная теория МВЭУ. Ч. I (гл. I–II). Москва: Изд-во Московского университета, 2007. 76 с. URL: <https://istina.msu.ru/publications/book/228438/?ysclid=lsn6k87m4o63024992>.
- [9] Кобрин А.И., Досаев М.З., Локшин Б.Я., Самсонов В.А., Селюцкий С.Ю. Конструктивная теория МВЭУ. Ч. II (гл. III). Москва: Изд-во Московского Университета, 2007. 88 с. URL: <https://istina.msu.ru/publications/book/7550412/?ysclid=lsn6q0my8q255403143>.
- [10] Воропаева Н.В., Соболев В.А. Геометрическая декомпозиция сингулярно возмущенных систем. Москва: ФИЗМАЛИТ, 2009. 256 с. URL: <https://reallib.org/reader?file=1500476&ysclid=lsn6tpqgi2824753463>; <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=15211477>. EDN: <https://www.elibrary.ru/muwrbw>.
- [11] Курина Г.А., Калашникова М.А. Сингулярно возмущенные задачи с разнотемповыми быстрыми переменными // Автоматика и телемеханика. 2022. № 11. С. 3–61. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0005231022110010>. EDN: <https://www.elibrary.ru/kdwmlx>.
- [12] Мищенко Е.Ф., Розов Н.Х. Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания. Москва: Наука, 1976. 248 с. URL: <https://ikfia.ysn.ru/wp-content/uploads/2018/01/MishchenkoRozov1975ru.pdf?ysclid=lsn760lz1a803139990>.
- [13] Соболев В.А., Щепаккина Е.А. Редукция моделей и критические явления в макрокинетики. Москва: ФИЗМАЛИТ, 2010. 320 с. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=21326259>. EDN: <https://www.elibrary.ru/ryrtfh>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-31-39

Submitted: 15.12.2023

Revised: 17.01.2024

Accepted: 15.05.2024

A.S. Kirsanova

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: askirsanova99@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-1799-1423>

RELAXATION OSCILLATIONS IN THE DARIE WIND POWER PLANT MODEL

ABSTRACT

The article discusses the mathematical model of the Daria small wind power plant. This installation is a type of vertical axis wind turbine named after its inventor, Georges Jean Marie Darrieux. The design consists of a vertically oriented shaft with curved blades or airfoils attached to it, forming a shape similar to an egg whisk. In today's world, against the backdrop of climate change and steadily increasing energy demand, wind energy acts as a critical pillar of the transition to renewable energy sources. This technology helps reduce carbon emissions and mitigate humanity's impact on the environment. In this context, wind energy is emerging not only as a means of supplying electricity, but also as a powerful catalyst for building a more sustainable and energy-efficient future. The equation of stationary modes is studied at the value of the external resistance of the dynamic model specified by the simplest equation. Conditions have been found under which relaxation oscillations are observed in the system.

Key words: mathematical modeling; dynamic models; wind power plant; function approximation; relaxation oscillations; singular perturbations; invariant manifolds; differential equations.

Citation. Kirsanova A.S. Relaxation oscillations in the Darie wind power plant model. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 31–39. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-31-39>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: author and reviewers declare no conflict of interests.

© Kirsanova A.S., 2024

Alena S. Kirsanova — postgraduate student of the Department of Differential Equations and Control Theory, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

References

- [1] Klimina L.A., Dosayev M.Z., Selyutski Yu.D. Dynamics of a Wind Turbine with the Working Element Based on an Antiparallel Link Mechanism. *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*, 2016, vol. 17, no. 8, pp. 536–540. DOI: <https://doi.org/10.17587/mau.17.536-540>. (In Russ.)
- [2] Andronov P.R., Dosaev M.Z., Dynnikova G.Y., Selyutskii Y.D., Strekalov S.D. Modeling of oscillating wind turbine. *Journal of Machinery Manufacture and Reliability*, 2009, vol. 38, no. 4, pp. 383–387. DOI: <https://doi.org/10.3103/S1052618809040153>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wrsift>. (In English; original in Russian)
- [3] Dosaev M.Z., Lin C.H., Lu W.L., Samsonov V.A., Selyutskii Y.D. A qualitative analysis of the steady modes of operation of small wind power generators. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 2009, vol. 73, no. 3, pp. 259–263. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jappmathmech.2009.07.015>. EDN: <https://www.elibrary.ru/ukvmqq>. (In English; original in Russian)
- [4] Dosaev M.Z., Samsonov V.A., Seliutski Yu.D. On the dynamics of a small-scale wind power generator. *Doklady Physics*, 2007, vol. 52, no. 9, pp. 493–495. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1028335807090091>. EDN: <https://www.elibrary.ru/lkgtzn>. (In English; original in Russian)
- [5] Dosaev M.Z., Samsonov V.A., Selyutskii Y.D., Lu W.-L., Lin C.-H. Bifurcation of operation modes of small wind power stations and optimization of their characteristics. *Mechanics of Solids*, 2009, vol. 44, no. 2, pp. 214–221. DOI: <https://doi.org/10.3103/S002565440902006X>. EDN: <https://www.elibrary.ru/mwuwdp>. (In English; original in Russian)
- [6] Kirsanova A.S. Bifurcations of stationary regimes in the model of a wind power plant. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2021, vol. 27, no. 4, pp. 92–98. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-92-98>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tcezeg>. (In Russ.)
- [7] Kirsanova A. Critical Phenomena in the Darrieus Wind Turbine Model. In: *2023 16th International Conference Management of large-scale system development (MLSD)*. Moscow, Russian Federation: IEEE, 2023, pp. 1–4. DOI: <http://doi.org/10.1109/MLSD58227.2023.10304042>.
- [8] Kobrin A.I., Dosaev M.Z., Lokshin B.Ya., Samsonov V.A., Selyutski S.Y. Constructive theory of small-scale wind power generators. Part I (Chapters I-II). Moscow: Izd-vo Moskovskogo Universiteta, 2007, 76 p. Available at: <https://istina.msu.ru/publications/book/228438/?ysclid=lsn6k87m4o63024992>. (In Russ.)
- [9] Kobrin A.I., Dosaev M.Z., Lokshin B.Ya., Samsonov V.A., Selyutski S.Y. Constructive theory of small-scale wind power generators. Part II (Chapter III). Moscow: Izd-vo Moskovskogo Universiteta, 2007, 88 p. Available at: <https://istina.msu.ru/publications/book/7550412/?ysclid=lsn6q0my8q255403143>. (In Russ.)
- [10] Voropaeva N.V., Sobolev V.A. Geometric decomposition of singularly perturbed systems. Moscow: FIZMATLIT, 2009, 256 p. Available at: <https://reallib.org/reader?file=1500476&ysclid=lsn6tpqgi2824753463>; <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=15211477>. EDN: <https://www.elibrary.ru/muwrwb>. (In Russ.)
- [11] Kurina G.A., Kalashnikova M.A. Singularly Perturbed Problems with Multi-Tempo Fast Variables. *Automation and Remote Control*, 2022, vol. 83, pp. 1679–1723. DOI: <https://doi.org/10.1134/S00051179220110017>. (In English; original in Russian)
- [12] Mishchenko E.F., Rozov N.H. Differential equations with small parameters and relaxation oscillations. Moscow: Nauka, 1976, 248 p. Available at: <https://ikfia.ysn.ru/wp-content/uploads/2018/01/MishchenkoRozov1975ru.pdf?ysclid=lsn760lz1a803139990>. (In Russ.)
- [13] Sobolev V.A., Shchepakina E.A. Reduction of models and critical phenomena in macrokinetics. Moscow: FIZMATLIT, 2010, 320 p. Available at: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=21326259>. EDN: <https://www.elibrary.ru/ryrtfh>. (In Russ.)

МЕХАНИКА

MECHANICS



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-40-49

Submitted: 14.11.2023

Revised: 20.12.2023

Accepted: 28.02.2024

V.L. Litvinov

Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

E-mail: vladlitvinov@rambler.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-6108-803X>

K.V. Litvinova

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

E-mail: kristinalitvinova900@rambler.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1711-9273>

ON ONE SOLUTION OF THE VIBRATION PROBLEM
OF MECHANICAL SYSTEMS WITH MOVING BOUNDARIES

ABSTRACT

An analytical method of solving the wave equation describing the oscillations of systems with moving boundaries is considered. By changing the variables that stop the boundaries and leave the equation invariant, the original boundary value problem is reduced to a system of functional-difference equations, which can be solved using direct and inverse methods. An inverse method is described that makes it possible to approximate quite diverse laws of boundary motion by laws obtained from solving the inverse problem. New particular solutions are obtained for a fairly wide range of laws of boundary motion. A direct asymptotic method for the approximate solution of a functional equation is considered. An estimate of the errors of the approximate method was made depending on the speed of the boundary movement.

Key words: wave equation; boundary value problems; oscillations of systems with moving boundaries; change of variables; laws of boundary motion; functional equations.

Citation. Litvinov V.L., Litvinova K.V. On one solution of the vibration problem of mechanical systems with moving boundaries. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya Seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 40–49. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-40-49>.

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Litvinov V.L., Litvinova K.V., 2024

Vladislav L. Litvinov — Candidate of Technical Sciences, head of the Department of General-Theoretical Disciplines, assistant professor, Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya Street, Samara, 443100, Russian Federation; doctoral student, Faculty of Mechanics and Mathematics, Lomonosov Moscow State University, GSP-1, Leninskie Gory, 1, Moscow, 119991, Russian Federation.

Kristina V. Litvinova — student, Lomonosov Moscow State University, GSP-1, Leninskie Gory, 1, Moscow, 119991, Russian Federation

Introduction

One-dimensional systems, the boundaries of which move, are widely used in engineering: ropes of lifting installations [1–9], flexible transmission links [1; 10–14], solid fuel rods [15], drill strings [3], etc. The presence of moving boundaries causes significant difficulties in describing such systems; therefore, approximate methods

of solution are mainly used here [1–3; 10; 14–21]. Among the analytical methods, the most effective is the method proposed in [11], which consists in the selection of new variables that stop the boundaries and leave the wave equation invariant. In [22], the solution is sought in the form of a superposition of two waves running towards each other. The method used in [23] is also effective, which consists in replacing the geometric variable with a purely imaginary variable, which allows us to apply the wave equation to the Laplace equation and apply the method of the theory of functions of a complex variable to the solution.

In this article an analytical method for solving the wave equation that describes the oscillations of systems with moving boundaries is proposed. By replacing the variables that stop the boundaries and leave the equation invariant, the original boundary value problem is reduced to a system of functional-difference equations that can be solved using direct and inverse methods. An inverse method is described which makes it possible to approximate quite diverse laws of boundary motion by laws obtained from solving the inverse problem. New particular solutions have been obtained for a fairly wide range of boundary motion laws. A direct asymptotic method for the approximate solution of a functional equation is considered. The errors of the approximate method are estimated, depending on the speed of the boundary movement. This approach successfully combines the methodology used in [11; 22; 24–27].

1. Statement of the problem

Let us consider free oscillations in a system with moving boundaries.

$$u_{tt}(x, t) - a^2 u_{xx}(x, t) = 0. \quad (1.1)$$

The boundary conditions at the fixed ends have the form

$$u(l_1(t), t) = 0; \quad u(l_2(t), t) = 0. \quad (1.2)$$

$$(l_1(0) \leq x \leq l_2(0))$$

Here, $u(x, t)$ is the displacement of the point of the object with the coordinate x at time t ; a is the velocity of wave propagation in the system; $l_1(x)$, $l_2(x)$ are the laws of boundary motion.

In works [11; 22] Vesnitsky A.I. proposed a fairly general method for selecting new variables for the wave equation. Following this method, the replacement of variables is performed in the following form:

$$\begin{aligned} \xi &= \varphi(t + x/a) - \psi(t - x/a); \\ \tau &= a^{-1} [\varphi(t + x/a) + \psi(t - x/a)], \end{aligned} \quad (1.3)$$

where φ and ψ are some functions. As a result of such a replacement, the original equation remains invariant (wave), and φ , ψ are determined from the condition of constancy ξ at the boundaries.

In new variables ξ , τ , defined by relation (1.3), the initial problem (1.1)–(1.2) is reduced to the following

$$U_{\tau\tau}(\xi, \tau) - U_{\xi\xi}(\xi, \tau) = 0 \quad (1.4)$$

under boundary conditions

$$U(l_1(\tau), \tau) = 0; \quad U_\xi(l_2(\tau), \tau) = 0; \quad (1.5)$$

$$(l_1(\tau) \leq \xi \leq l_2(\tau)).$$

Here τ , ξ are a dimensionless time ($\tau \geq 0$) and a dimensionless spatial coordinate; $U(\xi, \tau) = u(x, t)$; $l_i(\tau)$ – the laws of movement of borders.

Boundary conditions (1.5) in variables ξ , τ are set on new, generally speaking, moving boundaries, the position of which depends on two functions φ and ψ . Since they φ and ψ are arbitrary, one can require that the boundary conditions should be written on fixed boundaries, i. e. $l_1 = const$ and $l_2 = const$ ($l_2 > l_1$).

For this, it is necessary that φ and ψ necessary to satisfy the system of functional equations:

$$\begin{cases} \varphi(\tau + l_1(\tau)) - \psi(\tau - l_1(\tau)) = l_1; \\ \varphi(\tau + l_2(\tau)) - \psi(\tau - l_2(\tau)) = l_2, \end{cases} \quad (1.6)$$

which uniquely determine the functions of φ and ψ through the known laws of boundary motion. When the borders move at a speed higher than the speed of wave propagation, the solution of the wave equation becomes incorrect, therefore, a restriction is imposed on the speed of the boundaries $|l'_i(\tau)| < 1$. Constants l_i can be arbitrary, but not equal values (for example, $l_1 = 0$, $l_2 = 1$). Then system (1.6) will take the form:

$$\begin{cases} \varphi(\tau + l_1(\tau)) = \psi(\tau - l_1(\tau)); \\ \varphi(\tau + l_2(\tau)) = \psi(\tau - l_2(\tau)) + 1, \end{cases} \quad (1.7)$$

The existence of a solution to this system was proved in [11].

Solution (1.4)–(1.5) is found by the Fourier method [27]:

$$\begin{aligned} U(\xi, \tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sin(\omega_{0n}\xi) (D_n \cos(\omega_{0n}\tau) + E_n \sin(\omega_{0n}\tau)) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} r_n \{ \sin(\omega_{0n}(\tau + \xi) + \alpha_n) - \sin(\omega_{0n}(\tau - \xi) + \alpha_n) \}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

where $\omega_{0n}(\varepsilon_0\tau) = \frac{\pi n}{\ell_2 - \ell_1}$; $r_n = \frac{1}{2}\sqrt{D_n^2 + E_n^2}$; $\alpha_n = \text{arctg}(E_n/D_n)$.

The solution obtained in [1–3; 10–13; 22–24] has a form similar to (1.8).

Returning to the variables x and t , we get

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} r_n \{ \sin(\omega_{0n}\varphi(t + x) + \alpha_n) - \sin(\omega_{0n}\psi(t - x) + \alpha_n) \}. \quad (1.9)$$

Here φ and ψ , they are found from the solutions of the system of functional equations (1.7) according to the known laws of boundary motion, and the constants D_n , E_n are determined from the initial conditions.

Generally speaking, it is not easy to solve system (1.7). There are two different approaches to solving it:

– inverse problems [3, 11, 15, 22–26], i. e. according to the given "phases" of natural oscillations φ and ψ , finding the laws of motion of the boundaries $\ell_i(\tau)$;

– direct problems [15; 28], i. e. finding the "phases" of natural oscillations according to the given laws of motion of the boundaries $\ell_i(\tau)$.

2. Solution of the inverse problem

To solve system (1.7) A.I. Vesnitsky [11] used the inverse method, i. e. to the given φ and ψ from the resulting system of equations, the laws of boundary motion $\ell_1(\tau)$ and $\ell_2(\tau)$ are found. When solving the inverse problem, the equations of system (1.7) are reduced to the study of algebraic or transcendental equations with respect to $\ell_i(\tau)$, which in many cases admit exact solutions. Based on the inverse problem Vesnitsky A.I. and Potapov A.I. [11; 22] solutions for a fairly wide range of laws of boundary motion are obtained.

System (1.7) has infinitely many solutions, since on the interval $[0,1]$ the function $\varphi(z)$ and on the interval $[-1,0]$ the function $\psi(z)$ can be set arbitrarily, and using the method of successive approximations [27], the values of functions in other areas are found. It is enough for us to find one particular solution that determines the one-to-one correspondence of points z and points $y_1 = \varphi(z)$; $y_2 = \psi(z)$. Of all the solutions, we are only interested in monotone ones, and monotone solutions in the case of boundary movement at a speed lower than the wave propagation speed ($|\ell'_1(\tau)| < 1$; $|\ell'_2(\tau)| < 1$) can only be monotonously increasing.

Lemma. If the function $\varphi(z)$ – is monotonously increasing (decreasing), then the function $\psi(z)$ is also monotonously increasing (decreasing).

Proof. Indeed, from the first equation of system (1.7) at $\tau = \tau_0$, it follows that

$$\varphi(\tau_0 + \ell_1(\tau_0)) = \psi(\tau_0 - \ell_1(\tau_0)).$$

Now suppose that $\tau_1 > \tau_0$ and the function $\varphi(z)$ also increases (decreases), then in the case of boundary motion at a speed lower than the wave propagation speed ($|\ell'_1(\tau)| < 1$; $|\ell'_2(\tau)| < 1$), we will have:

$$\tau_1 + \ell_1(\tau_1) > \tau_0 + \ell_1(\tau_0);$$

$$\tau_1 - \ell_1(\tau_1) > \tau_0 - \ell_1(\tau_0)$$

Since the function $\varphi(z)$ in this case increases (decreases), then in order to perform the first equality of system (1.7) at $\tau = \tau_1$, it is necessary that the function $\psi(z)$ increases (decreases), i.e. the function $\psi(z)$ is also increasing (decreasing).

Let us also show that the monotonic solution of system (1.7) in the case of boundary motion at a speed lower than the wave propagation velocity can only be increasing.

Indeed, given the inequality $\ell_1(\tau) < \ell_2(\tau)$ we get:

$$\tau + \ell_1(\tau) < \tau + \ell_2(\tau); \quad \tau - \ell_1(\tau) > \tau - \ell_2(\tau);$$

Suppose that $\varphi(z)$ and $\psi(z)$ they decrease, then we can write:

$$\varphi(\tau + \ell_2(\tau)) < \varphi(\tau + \ell_1(\tau)) = \psi(\tau - \ell_1(\tau)) < \psi(\tau - \ell_2(\tau)).$$

However, this inequality contradicts the second equation of system (1.7). Therefore, functions $\varphi(z)$ and $\psi(z)$ can only be monotonically increasing. The lemma is proved. \square

Note that from system (1.7) the functions $\varphi(z)$ and $\psi(z)$ are determined up to a constant in the sense that if $\varphi(z)$ and $\psi(z)$ are the solution of system (1.7), then $\varphi(z) + C$ and $\psi(z) + C$ are also a solution

(here C — is an arbitrary constant). Therefore, for certainty, we can choose such a function $\psi(z)$, that $\psi(-1) = -1$. At the same time, from the second equation of system (1.7) for $\tau = 0$, it follows that $\varphi(1) = 0$. From the first equation of system (1.7) for $\tau = 0$, we obtain

$$\varphi(0) = \psi(0).$$

When assigning functions $\varphi(z)$ and $\psi(z)$, several arbitrary constants are introduced into them. The dependence of the found laws of motion $\ell_1(\tau)$ and $\ell_2(\tau)$ found on the values of these constants makes it possible to approximate quite diverse laws of motion of the boundaries by laws obtained from solving the inverse problem.

The set of reverse solutions is quite wide. The solutions below satisfy the relations:

$$\ell_1(0) = 0; \ell_2(0) = 1; \psi(-1) = -1.$$

The set of obtained laws of motion of boundaries is divided into classes:

1. The solutions shown in Table 2.1 belong to class A when the left boundary is fixed and $\varphi(z) = \psi(z)$. Solutions numbered 1, 2, 3, 6 were obtained by A.I. Vesnitsky and A.I. Potapov [11; 22], solutions 4, 5, 7 were obtained for the first time.

Table 2.1

Class A decisions

Таблица 2.1

Решения класса А

	$\ell_2(\tau)$	$\varphi(z) = \psi(z)$
1	$\nu\tau + 1$	$\frac{\text{Ln}[(\nu z + 1)/(1 - \nu)]}{\text{Ln}[(1 + \nu)/(1 - \nu)]} - 1$
2	$\sqrt{B\tau + B^2}/ B $	$\frac{\sqrt{Bz + B + 0,25} - \sqrt{B^2 - B + 0,25}}{B} - 1$
3	$1/(4B\tau + 1)$	$Bz^2 + 0,5z - B - 0,5$
4	$\frac{1}{\alpha} \text{arcsch} \left[\frac{0,5}{B_1 e^{\alpha\tau} - B_2 e^{-\alpha\tau}} \right]$	$B_1(e^{\alpha z} - e^{-\alpha}) + B_2(e^{-\alpha z} - e^{\alpha}) - 1,$ $B_1 = B_2 + 1/(e^{\alpha} - e^{-\alpha}), \alpha > 0$
5	$\sqrt{(\tau + B)^2(\alpha^2 - 1) + 1 + 2\alpha B + B^2} - \alpha(\tau + B)$	$\frac{\text{Ln}[(z+B)^2 + 1 + 2\alpha B + B^2]}{\text{Ln}[(1+\alpha)/(1-\alpha)]} - \frac{\text{Ln}[(B-1)^2 + 1 + 2\alpha B + B^2]}{\text{Ln}[(1+\alpha)/(1-\alpha)]} - 1$
6	$\frac{1}{\alpha} \left[-d + \sqrt{1 + d^2 + (\alpha\tau + B)^2} \right],$ $d = \frac{1+B^2-\alpha^2}{2\alpha}$	$\frac{\text{arctg}(\alpha z + B)}{\text{arctg}[(1+B^2-\alpha^2)/(2\alpha)]} - \frac{\text{arctg}(B-\alpha)}{\text{arctg}[(1+B^2-\alpha^2)/(2\alpha)]} - 1$
7	$\frac{1}{\alpha} \left(\ln \frac{1 + \sqrt{1 + 4A^2 e^{2\alpha\tau}}}{2A} \right) - \tau$	$Ae^{\alpha z} + B, \alpha = \ln \frac{1 + \sqrt{1 + 4A^2}}{2A}$

2. The next class B is determined by the fact that the boundaries move according to the same law:

$$\ell_1(\tau) = \ell(\tau); \ell_2(\tau) = 1 + \ell(\tau); \ell(0) = 0.$$

Since the movement of the boundaries is interconnected, there is also an interconnection between the functions $\varphi(z)$ and $\psi(z)$. It is expressed by the functional equation:

$$\varphi(\bar{\varphi}(\psi(z)) + 1) - \psi(z - 1) = 1. \tag{2.1}$$

System (1.7) in this case can only be satisfied by functions that are solutions of equation (2.1). Here are two previously unknown solutions of class B:

- 1) $\ell = \nu\tau; \varphi(z) = (1 - \nu)z/2 + (1 + \nu)/2 - 1;$

- $\psi(z) = (1 + \nu)z/2 + (1 + \nu)/2 - 1;$
 2) $\ell(\tau) = \frac{1}{\alpha} \ln[(Be^{-\alpha\tau} - Ce^{\alpha\tau})/(B - C)];$
 $\varphi(z) = B(e^{-\alpha z} - 1) - C(e^{-\alpha} - 1) - 1; B = C + 1/(e^{-\alpha} - 1);$
 $\psi(z) = C(e^{\alpha z} - 1) - C(e^{-\alpha} - 1) - 1.$
 3. For class C solutions, the boundaries move symmetrically in different directions, i.e.

$$\ell_1(\tau) = -\ell(\tau); \ell_2(\tau) = \ell(\tau).$$

The equation of the relationship of functions $\varphi(z)$ and $\psi(z)$ here has the form:

$$\varphi(z) = \psi(z) + 0,5$$

Class C solutions are obtained from class A solutions using the following formulas:

$$\ell(\tau) = \ell_A(\tau); \psi(z) = \frac{1}{2}\psi_A(z); \varphi(z) = \psi(z) + 0,5,$$

where the corresponding functions of class A solutions are indicated with the index A.

4. A solution of class D is obtained for the case when both boundaries move uniformly:

$$\ell_1(\tau) = (B_2 - B_1)\tau/(B_2 + B_1); \ell_2(\tau) = (B_2e^{1/c} - B_1)\tau/(B_1 + B_2e^{1/c}) + 1;$$

$$\varphi(z) = C \operatorname{Ln}(B_1z + D) - C \operatorname{Ln}(D - B_2) - 1;$$

$$\psi(z) = C \operatorname{Ln}(B_1z + D) - C \operatorname{Ln}(D - B_2) - 1;$$

$$D = (B_1 + B_2e^{1/c})/(e^{1/c} - 1).$$

The solution number one in Table 2.1 can be used to study the rope vibrations of load-lifting installations at uniform ascent (descent) [1; 2; 4–9]. The above solutions of class B can be used in the study of oscillations of flexible transmission links [12–14]. The rest of the solutions are model.

The class of inverse solutions is limited, for example, no solution was obtained for the uniformly accelerated motion of the boundary $l(\tau) = 1 + \nu\tau^2$. Obtaining the indicated solution is relevant when describing the longitudinal and transverse vibrations of the ropes of load-lifting installations at the acceleration stage [1].

3. Solution of the direct problem

The solution of the direct problem, as a rule, faces great difficulties. Well-known methods for solving functional equations, sometimes can find φ and ψ from known ones $\ell_i(\tau)$, but in a limited range of argument values and in a form that is not very suitable for analytical research.

In this regard, we consider an approximate solution of the functional equation

$$\varphi(\tau + l(\tau)) - \varphi(\tau - l(\tau)) = 1. \tag{3.1}$$

For an approximate solution of equation (3.1), it is proposed to use the asymptotic method [28].

For fixed boundaries $\ell(\tau) = \ell$, the solution to (3.1) is the linear function

$$\varphi_s(z) = \frac{1}{2\ell}z + \text{const.}$$

In the case of a slow motion of the boundary $\ell(\tau)$, the “phase” of the wave $\varphi(z)$ during its run through the system changes slightly with respect to $\varphi_s(z)$. It is assumed that $\varphi(z)$ has derivatives of any order, and writing $\varphi(\tau + \ell(\tau))$ in the form of power series in $\ell(\tau)$, after substituting them into (1.1), we obtain a differential equation for slowly changing current “phase” $\varphi(\tau)$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\ell^{k+1}}{(k+1)!} \cdot \frac{d^{k+1}\varphi}{d\tau^{k+1}} = 1. \tag{3.2}$$

Since $\varphi(\tau)$ deviates slightly from the linear law $\varphi_s(z = \tau)$ during the wave travel time, each next term on the left side of equation (3.2) is much smaller than the previous one, and its solution must be sought in the form of a series

$$\varphi(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(\tau). \tag{3.3}$$

Substituting (3.3) into (3.2) and equating the terms of the same order of smallness individually to zero, we obtain for the zero approximation

$$\varphi_0(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{\tau} \frac{dt}{\ell(t)}.$$

In the case of a linear law of motion of the boundary $\ell(t) = 1 + \nu\tau$, the phase of dynamic natural oscillations is equal to

$$\varphi(z) = \frac{\ln[(\nu z + 1)/(1 + \nu)]}{2\nu}. \tag{3.4}$$

Values (3.4) were compared with the values obtained using the exact solution (Table 2.1):

$$\varphi(z) = \frac{Ln[(\nu z + 1)/(1 - \nu)]}{Ln[(1 + \nu)/(1 - \nu)]} - 1. \tag{3.5}$$

The values of the maximum absolute errors Δ of the asymptotic method, depending on the speed of the boundary movement ν , are given in Table 3.1.

Table 3.1

Error of the asymptotic method depending on the velocity of the boundary

Таблица 3.1

Погрешность асимптотического метода в зависимости от скорости границы

ν	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
Δ	0,002	0,006	0,013	0,023	0,036	0,053	0,073	0,100	0,139

In the interval $\nu \in [0, 1; 0, 6]$ the errors of the approximate method are small. The increase of the error when ν approaches unity is explained by the fact that the function (3.5) becomes infinitely large when $\nu \rightarrow 1$.

Insignificant errors make it possible to apply the described method to solve functional equation (3.1) in cases where its exact solution is not known.

Conclusion

Using the analytical method of variable substitution, the original boundary value problem is reduced to a system of functional-difference equations. The solution of the original problem depends on whether it is possible to solve the given system (1.7). Vesnitsky A.I. proposed to solve it by the reverse method, i.e. to set functions φ and ψ and from the resulting system of equations to find the laws of motion of the boundaries. The paper presents five new inverse solutions of the system.

An approximate asymptotic method for solving the functional equations of system (1.7) is considered. Under conditions of slow motion of the boundaries, minor errors make it possible to apply this method in cases where the exact solution of the system of functional equations is not known.

The above solutions can be used in the study of rope vibrations of lifting installations with a uniform ascent (descent), flexible links of transmission (for example, a belt drive), etc.

References

- [1] Savin G.N., Goroshko O.A. Dynamics of a thread of variable length. Kyiv, 1962, 332 p. (In Russ.)
- [2] Goroshko O.A., Savin G.N. Introduction to the mechanics of deformable one-dimensional bodies of variable length. Kiev: Naukova Dumka, 1971, 270 p. (In Russ.)
- [3] Litvinov V.L., Anisimov V.N. Mathematical modeling and study of oscillations of one-dimensional mechanical systems with moving boundaries: monograph. Samara: Samarskii gosudarstvennyi tekhnicheskii universitet, 2017, 149 p. Available at: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=36581641>. EDN: <https://www.elibrary.ru/yqksvn>. (In Russ.)
- [4] Kolosov L.B., Zhigula T.I. Longitudinal and transverse vibrations of the rope string of the lifting installation. *News of the Higher Institutions. Mining Journal*, 1981, no. 3, pp. 83–86. (In Russ.)
- [5] Zhu W.D., Chen Y. Theoretical and experimental investigation of elevator cable dynamics and control. *Journal of Vibrations and Acoustics*, 2006, vol. 128, issue 1, pp. 66–78. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.2128640>.
- [6] Shi Y., Wu L., Wang Y. Nonlinear analysis of natural frequencies of a cable system. *Journal of Vibration Engineering & Technologies*, 2006, no. 2, pp. 173–178.
- [7] Wang L., Zhao Y. Multiple internal resonances and non-planar dynamics of shallow suspended cables to the harmonic excitations. *Journal of Sound and Vibration*, 2009, vol. 319, issues 1–2, pp. 1–14. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jsv.2008.08.020>.

- [8] Zhao Y., Wang L. On the symmetrical modal interaction of the suspended cable: Three-to one internal resonance. *Journal of Sound and Vibration*, 2006, vol. 294, issues 4–5, pp. 1073–1093. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2006.01.004>.
- [9] Litvinov V.L. Longitudinal oscillations of the rope of variable length with a load at the end. *Bulletin of Science and Technical Development*, 2016, no. 1 (101), pp. 19–24. Available at: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=919>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=28765822>. EDN: <https://elibrary.ru/yfmnrx>. (In Russ.)
- [10] Samarina Yu.P. On a nonlinear problem for a wave equation in a one-dimensional space. *Applied Mathematics and Mechanics*, 1964, vol. 26, no. 3, pp. 77–80. Available at: <https://pmm.ipmnet.ru/ru/Issues/1964/28-3>. (In Russ.)
- [11] Vesnitsky A.I. Waves in systems with moving boundaries and loads. Moscow: Fizmatlit, 2001, 320 p. Available at: <https://knigogid.ru/books/1915093-volny-v-sistemah-s-dvizhuschimisya-granicami-i-nagruzkami/toread?ysclid=lnx2mbqz7e29843152>. (In Russ.)
- [12] Litvinov V.L., Anisimov V.N. Transverse vibrations rope moving in longitudinal direction. *Izvestia of Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 2017, vol. 19, no. 4, pp. 161–166. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=32269460>. EDN: <https://elibrary.ru/tboayo>. (In Russ.)
- [13] Erofeev V.I., Kolesov D.A., Lisenkova E.E. Investigation of wave processes in a one-dimensional system lying on an elastic-inertial base with a moving load. *Bulletin of Science and Technical Development*, 2013, no. 6 (70), pp. 18–29. Available at: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=696>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=22010422>. EDN: <https://elibrary.ru/snqzyx>. (In Russ.)
- [14] Litvinov V.L. Transverse vibrations viscoelastic rope variable length on an elastic foundation with considering the influence of the resistance forces environmental. *Bulletin of Science and Technical Development*, 2015, no. 4 (92), pp. 29–33. Available at: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=845>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=29275371>. EDN: <https://elibrary.ru/yqqqlqb>. (In Russ.)
- [15] Litvinov V.L. Exact and approximate solutions the problem of oscillations of a rod of variable length. *Bulletin of Science and Technical Development*, 2017, no. 9 (121), pp. 46–57. Available at: <https://vntr.ru/vols/2017-09/5vntr9-121.pdf>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=30267074>. EDN: <https://elibrary.ru/zmiruh>. (In Russ.)
- [16] Anisimov V.N., Litvinov V.L. Investigation of resonance characteristics of mechanical objects with moving borders by application of the Kantorovich-Galyorkin method. *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, 2009, № 1 (18), pp. 149–158. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu658>. EDN: <https://www.elibrary.ru/kzzxnn>. (In Russ.)
- [17] Lezhneva A.A. Flexural oscillations of a beam of variable length. *Mechanics of Solids*, 1970, no. 1, pp. 159–161. (In Russ.)
- [18] Anisimov V.N., Korpen I.V., Litvinov V.L. Application of the Kantorovich-Galerkin method for solving boundary value problems with conditions on moving boundaries. *Mechanics of Solids*, 2018, vol. 53, no. 2, pp. 177–183. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0025654418020085>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wtoftx>. (in English; original in Russian)
- [19] Litvinov V.L. Solution of boundary value problems with moving boundaries by an approximate method for constructing solutions of integro-differential equations. *Proceedings of Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics UB RAS*, 2020, vol. 26, no. 2, pp. 188–199. DOI: <https://doi.org/10.21538/0134-4889-2020-26-2-188-199>. EDN: <https://elibrary.ru/lgjahf>. (In Russ.)
- [20] Litvinov V.L., Litvinova K.V. An approximate method for solving boundary value problems with moving boundaries by reduction to integro-differential equations. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2022, vol. 62, № 6, pp. 945–954. DOI: <https://doi.org/10.1134/s0965542522060112>. EDN: <https://elibrary.ru/qexsaz>. (In English; original in Russian)
- [21] Litvinov V.L. Variational formulation of the problem on vibrations of a beam with a moving spring-loaded support. *Theoretical and Mathematical Physics*, 2023, vol. 215, issue 2, pp. 709–715. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0040577923050094>. (In English; original in Russian)
- [22] Vesnitsky A.I. Inverse problem for a one-dimensional resonator changing its dimensions in time. *Izv. vuzov. Radiophysics*, 1971, vol. 10, Pp. 1538–1542.
- [23] Barsukov K.A., Grigoryan G.A. On the theory of a waveguide with movable boundaries. *Izv. vuzov. Radiophysics*, 1976, vol. 2, pp. 280–285.
- [24] Anisimov V.N., Litvinov V.L., Korpen I.V. On a method of analytical solution of wave equation describing the oscillations sistem with moving boundaries. *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, 2012, № 3(28), pp. 145–151. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu1079>. EDN: <https://www.elibrary.ru/qbutvh>. (In Russ.)
- [25] Litvinov V.L. Solving boundary value problems with moving boundaries using the method of change of variables in the functional equation. *Middle Volga Mathematical Society Journal*, 2013, vol. 15, № 3, pp. 112–119. Available at: <https://www.mathnet.ru/rus/svmo405>. (In Russ.)

- [26] Anisimov V.N., Litvinov V.L. Analytical method of solving wave equation with a wide range of conditions for a moving boundary. *Bulletin of Science and Technical Development*, 2016, no. 2 (102), pp. 28–35. Available at: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=929>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=28765827>. EDN: <https://elibrary.ru/yfmmzp>. (In Russ.)
- [27] Koshlyakov N.S., Gliner E.B., Smirnov M.M. Equations in partial derivatives of mathematical physics. Moscow: Vysshaya shkola, 1970. Available at: <https://alexandr4784.narod.ru/kgs.html?ysclid=lnyc6xnrdc604386929>. (In Russ.)
- [28] Litvinov V.L. Study free vibrations of mechanical objects with moving boundaries using asymptotical method. *Middle Volga Mathematical Society Journal*, 2014, vol. 16, issue 1, pp. 83–88. Available at: <https://journal.svmo.ru/archive/article?id=1295>. (In Russ.)



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-40-49

УДК 517.958:531.12; 534.11

Дата: поступления статьи: 14.11.2023
после рецензирования: 20.12.2023
принятия статьи: 28.02.2024

В.Л. Литвинов

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация
E-mail: vladlitvinov@rambler.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-6108-803X>

К.В. Литвинова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация
E-mail: kristinalitvinova900@rambler.ru. ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1711-9273>

ОБ ОДНОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ О КОЛЕБАНИЯХ МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ДВИЖУЩИМИСЯ ГРАНИЦАМИ

АННОТАЦИЯ

В статье рассмотрен аналитический метод решения волнового уравнения, описывающего колебания систем с движущимися границами. Заменяя переменные, останавливающие границы и оставляющие уравнение инвариантным, исходная краевая задача сводится к системе функционально-разностных уравнений, которая решена прямым и обратным методами. Описан также обратный метод, позволяющий аппроксимировать весьма разнообразные законы движения границы законами, полученными в результате решения обратной задачи. Новые частные решения получены для достаточно широкого круга законов движения границы. С помощью прямого асимптотического метода рассматривается приближенное решение функционального уравнения. Оценка погрешностей приближенного метода производится в зависимости от скорости движения границы.

Ключевые слова: волновое уравнение; краевые задачи; колебания систем с подвижными границами; замена переменных; законы движения границ; функциональные уравнения.

Цитирование. Litvinov V.L., Litvinova K.V. On one solution of the problem of vibrations of mechanical systems with moving boundaries // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 40–49. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-40-49>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Литвинов В.Л., Литвинова К.В., 2024

Владислав Львович Литвинов — кандидат технических наук, заведующий кафедрой общетеоретических дисциплин, доцент, Самарский государственный технический университет, 443100, Российская Федерация, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244; докторант МГУ имени М.В. Ломоносова, механико-математический факультет, ГСП-1, 119991, Российская Федерация, г. Москва, Ленинские горы, 1.

Кристина Владимировна Литвинова — студент 4 курса, МГУ имени М.В. Ломоносова, ГСП-1, 119991, Российская Федерация, г. Москва, Ленинские горы, 1.

Литература

- [1] Савин Г.Н., Горошко О.А. Динамика нити переменной длины. Киев, 1962, 332 с.
- [2] Горошко О.А., Савин Г.Н. Введение в механику деформируемых одномерных тел переменной длины. Киев: Наукова Думка, 1971, 270 с.
- [3] Литвинов В.Л., Анисимов В.Н. Математическое моделирование и исследование колебаний одномерных механических систем с движущимися границами. Самара: Самарский государственный технический университет, 2017. 149 с. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=36581641>. EDN: <https://www.elibrary.ru/yqksvn>.
- [4] Колосов Л.В., Жигула Т.И. Продольно-поперечные колебания струны каната подъемной установки // Изв. вузов. Сер.: Горный журнал. 1981. № 3. С. 83–86.
- [5] Zhu W.D., Chen Y. Theoretical and experimental investigation of elevator cable dynamics and control // Journal of Vibrations and Acoustics, 2006, vol. 128, issue 1, pp. 66–78. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.2128640>.
- [6] Shi Y., Wu L., Wang Y. Nonlinear analysis of natural frequencies of a cable system // Journal of Vibration Engineering & Technologies, 2006, no. 2, pp. 173–178.
- [7] Wang L., Zhao Y. Multiple internal resonances and non-planar dynamics of shallow suspended cables to the harmonic excitations // Journal of Sound and Vibration, 2009, vol. 319, issues 1–2, pp. 1–14. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jsv.2008.08.020>.
- [8] Zhao Y., Wang L. On the symmetrical modal interaction of the suspended cable: three-to one in-ternal resonance // Journal of Sound and Vibration, 2006, vol. 294, issues 4–5, pp. 1073–1093. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2006.01.004>.
- [9] Литвинов В.Л. Продольные колебания каната переменной длины с грузом на конце // Вестник научно-технического развития. 2016. № 1 (101). С. 19–24. URL: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=919>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=28765822>. EDN: <https://elibrary.ru/yfmmxr>.
- [10] Самарин Ю.П. Об одной нелинейной задаче для волнового уравнения в одномерном пространстве // Прикладная математика и механика. 1964. Т. 28, № 3. С. 542–543. URL: <https://pmm.ipmnet.ru/ru/Issues/1964/28-3>.
- [11] Весницкий А.И. Волны в системах с движущимися границами и нагрузками. Москва: Физматлит, 2001. 320 с. URL: <https://knigogid.ru/books/1915093-volny-v-sistemah-s-dvizhuschimisa-granicami-i-nagruzkami/toread?ysclid=lnx2mbqz7e29843152>.
- [12] Литвинов В.Л., Анисимов В.Н. Поперечные колебания каната, движущегося в продольном направлении // Известия Самарского научного центра Российской Академии наук. 2017. Т. 19, № 4. С. 161–166. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=32269460>. EDN: <https://elibrary.ru/tboayo>.
- [13] Ерофеев В.И., Колесов Д.А., Лисенкова Е.Е. Исследование волновых процессов в одномерной системе, лежащей на упруго-инерционном основании, с движущейся нагрузкой // Вестник научно-технического развития. 2013. № 6 (70). С. 18–29. URL: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=696>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=22010422>. EDN: <https://elibrary.ru/snqzyx>.
- [14] Литвинов В.Л. Поперечные колебания вязкоупругого каната переменной длины, лежащего на упругом основании, с учетом влияния сил сопротивления среды // Вестник научно-технического развития. 2015. № 4 (92). С. 29–33. URL: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=845>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=29275371>. EDN: <https://elibrary.ru/yqqqlqb>.
- [15] Литвинов В.Л. Точное и приближенное решения задачи о колебаниях стержня переменной длины // Вестник научно-технического развития. 2017. № 9 (121). С. 46–57. URL: <https://vntr.ru/vols/2017-09/5vntr9-121.pdf>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=30267074>. EDN: <https://elibrary.ru/zmiruh>.
- [16] Анисимов В.Н., Литвинов В.Л. Исследование резонансных свойств механических объектов с движущимися границами при помощи метода Канторовича–Галеркина // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Физико-математические науки. 2009. Вып. 1 (18). С. 149–158. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu658>. EDN: <https://www.elibrary.ru/kzzxnn>.
- [17] Лежнева А.А. Изгибные колебания балки переменной длины // Известия Российской Академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 1970. № 1. Р. 159–161.
- [18] Анисимов В.Н., Корпен И.В., Литвинов В.Л. Применение метода Канторовича–Галеркина для решения краевых задач с условиями на движущихся границах // Известия Российской Академии наук. Сер.: Механика твердого тела. 2018. № 2. С. 70–77. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=32836734>. EDN: <https://elibrary.ru/ywsllt>.
- [19] Литвинов В.Л. Решение краевых задач с движущимися границами при помощи приближенного метода построения решений интегродифференциальных уравнений // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2020. Т. 26, № 2. С. 188–199. DOI: <https://doi.org/10.21538/0134-4889-2020-26-2-188-199>. EDN: <https://elibrary.ru/lgjahf>.

- [20] Литвинов В.Л., Литвинова К.В. Приближенный метод решения краевых задач с подвижными границами путем сведения к интегродифференциальным уравнениям // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2022. Т. 62, № 6. С. 977–986. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0044466922060126>. EDN: <https://elibrary.ru/nhedup>.
- [21] Литвинов В.Л. Вариационная постановка задачи о колебаниях балки с подвижной подпружиненной опорой // Теоретическая и математическая физика. 2023. Т. 215. № 2. С. 289–296. DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf10473>.
- [22] Vesnitsky A.I. Inverse problem for a one-dimensional resonator changing its dimensions in time // *Izv.vuzov. Radiophysics*. 1971. Vol. 10. Pp. 1538–1542.
- [23] Barsukov K.A., Grigoryan G.A. On the theory of a waveguide with movable boundaries // *Izv. vuzov. Radiophysics*. 1976. Vol. 2. Pp. 280–285.
- [24] Анисимов В.Н., Литвинов В.Л., Корпен И.В. Об одном методе получения аналитического решения волнового уравнения, описывающего колебания систем с движущимися границами // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Физико-математические науки. 2012. № 3(28). С. 145–151. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu1079>. EDN: <https://www.elibrary.ru/qbutvh>.
- [25] Литвинов В.Л. Решение краевых задач с движущимися границами при помощи метода замены переменных в функциональном уравнении // Журнал Средневолжского математического общества. 2013. Т. 15, № 3. С. 112–119. Available at: <https://www.mathnet.ru/rus/svmo405>.
- [26] Литвинов В.Л., Анисимов В.Н. Аналитический метод решения волнового уравнения с широким классом условий на движущихся границах // Вестник научно-технического развития. 2016. № 2(102). С. 28–35. URL: <https://vntr.ru/ftpgetfile.php?id=929>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=28765827>. EDN: <https://elibrary.ru/yfmnzp>.
- [27] Кошляков Н.С., Глинер Е.Б., Смирнов М.М. Уравнения в частных производных математической физики. Москва: Высшая школа, 1970. URL: <https://alexandr4784.narod.ru/kgs.html?ysclid=lnyc6xnrdc604386929>.
- [28] Литвинов В.Л. Исследование свободных колебаний механических объектов с движущимися границами при помощи асимптотического метода // Журнал Средневолжского математического общества. 2014. Т. 16, № 1. С. 83–88. URL: <https://journal.svmo.ru/archive/article?id=1295>.



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-50-63

УДК 539.3

Дата: поступления статьи: 15.01.2024
после рецензирования: 21.02.2024
принятия статьи: 28.02.2024

К.Б. Устинов

Институт проблем механики
имени А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Российская Федерация
E-mail: ustinov@ipmnet.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5852-3355>

Д.В. Гандилян

Институт проблем механики
имени А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Российская Федерация
E-mail: david.ghandilyan@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-8469-4380>

О ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ДЛЯ ТОНКОЙ КРУГЛОЙ ПЛАСТИНЫ, СОПРЯЖЕННОЙ С МАССИВНЫМ ТЕЛОМ

АННОТАЦИЯ

Рассматривается задача о деформировании под действием равномерного давления круговой пластины, сопряженной с массивным основанием, при этом условие сопряжения пластины с основанием моделируется использованием граничных условий типа обобщенной упругой заделки, т. е. связи изгибающего момента и усилий на краю пластины со смещениями и углом поворота посредством матрицы податливости. Основной целью работы является исследование влияния упругости заделки на упругий отклик пластины. Решение задачи получено в постановке линейной теории пластин, теории мембран в приближении однородности продольных усилий и теории Фешля — фон Кармана, также в приближении предположения однородности продольных усилий. Значения коэффициентов матрицы податливости получены с помощью метода конечных элементов для вспомогательной задачи и сравнены со значениями коэффициентов, полученных для близких задач аналитическими методами. Численные результаты получены для пластины из алюминия на кремниевом основании. Проведено сравнение полученного решения с решением, полученным для условия жесткой заделки для всех трех использованных моделей. Показано, что в случае больших прогибов (несколько толщин пластины) учет податливости заделки становится существенным.

Ключевые слова: тонкая пластина; граничные условия для пластин; упругая заделка; матрица податливости.

Цитирование. Устинов К.Б., Гандилян Д.В. О граничных условиях для тонкой круглой пластины, сопряженной с массивным телом // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 50–63. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-50-63>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Устинов К.Б., Гандилян Д.В., 2024

Константин Борисович Устинов — доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории геомеханики, Институт проблем механики имени А.Ю. Ишлинского РАН, 119526, Российская Федерация, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1.

Давид Ваганович Гандилян — аспирант, младший научный сотрудник лаборатории механики технологических процессов, Институт проблем механики имени А.Ю. Ишлинского РАН, 119526, Российская Федерация, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1.

1. Предварительные сведения

При моделировании тонкостенных элементов конструкций, сопряженных с массивными телами, тонкостенные элементы удобно моделировать в рамках различных двумерных или одномерных моделей: пластин, оболочек, балок. При этом в качестве граничных условий обычно используют условие жесткого защемления, оправдывая это «массивностью» тел, с которыми рассматриваемые тонкостенные элементы сопрягаются. Однако более детальное рассмотрение показывает, что условие жесткого защемления выполняется лишь приближенно, и что более точными являются условия упругой заделки, когда кинематические параметры — компоненты смещения средней плоскости и углы поворота связываются с силовыми параметрами — продольными и поперечными усилиями и изгибающими моментами посредством матрицы податливости [1–15]. Более простые, скалярные, соотношения использовались в работах [16; 17]. На необходимость учета податливости заделки указывалось и в более ранних работах [18–23], где были предложены приближенные модели для их оценки. Условие жесткого защемления может быть получено как частный случай путем обнуления коэффициентов податливости матрицы, либо соответствующих предельных переходов. В упомянутых работах рассматривались ситуации отслоения тонкой пленки (пластины) от массива либо расслоение составных пластин, и были вычислены коэффициенты соответствующих матриц податливости (полный набор либо коэффициенты, вносящие наибольший вклад). В частности, было показано [2; 12], что даже деформирование пластины, имеющей полный контакт с абсолютно жестким основанием вне области отслоения (потери контакта с основанием), более точно описывается при использовании граничных условий типа упругой заделки. В настоящей статье рассматривается иной случай, а именно деформирование тонкого слоя, сцепленного с массивным основанием, имеющим цилиндрическое отверстие, за счет давления на слой через данное отверстие (рис. 1.1). Подобные задачи возникают при идентификации экспериментально определяемых параметров ультратонких элементов МЭМС, используемых, в частности, в проекционных литографических системах [24–28].

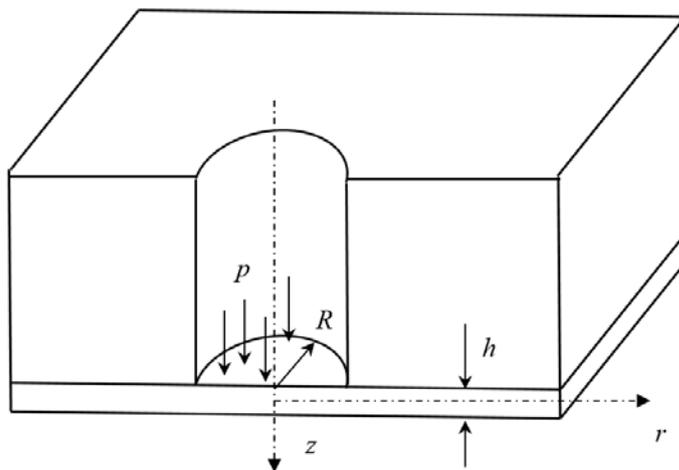


Рис. 1.1. Тонкий упругий слой, сцепленный с массивным основанием, имеющим цилиндрическое отверстие

Fig. 1.1. A thin elastic layer adhered to a massive base having a cylindrical hole

Участок тонкого слоя, находящегося над отверстием, будет рассматриваться как равномерно нагруженная пластина. При этом будут использоваться граничные условия, соответствующие упругой заделке.

2. Постановка задачи

Рассмотрим слой толщины h , сцепленный с массивным основанием, имеющим цилиндрическое отверстие радиуса R , со стороны которого на слой прикладывается давление p . Введем цилиндрическую систему координат r, φ, z с осью z , расположенной по центру отверстия, и направленную в сторону, противоположную от прилегающего основания (рис. 1.1).

Деформация слоя может описываться в приближении теории пластин, где в качестве кинематических переменных используются радиальная и нормальная компоненты смещения его серединной плоскости u, w . К настоящему времени разработано много вариантов теории пластин, отличающихся как

степенью сложности, так и степенью строгости учета различных факторов. Рассмотрение вариантов теорий и областей их применения не входит в задачу настоящей работы, данный вопрос рассмотрен, например в [29], см. также цитируемую там литературу.

Рассмотрим вариант описания деформирования пластины Фешля — фон Кармана, уравнения для которого в случае осевой симметрии могут быть записаны в виде [29; 30]:

$$D\Delta^2 w - \left(T_{rr} \frac{d^2 w}{dr^2} + T_{\varphi\varphi} \frac{1}{r} \frac{dw}{dr} \right) = q, \quad (2.1)$$

$$\frac{T_{rr} - T_{\varphi\varphi}}{r} + \frac{dT_{rr}}{dr} = 0, \quad (2.2)$$

$$T_{rr} = \frac{Eh}{1-\nu^2} \left[\frac{du}{dr} + \frac{1}{2} \left(\frac{dw}{dr} \right)^2 + \nu \frac{u}{r} \right], \quad (2.3)$$

$$T_{\varphi\varphi} = \left[\frac{u}{r} + \nu \frac{du}{dr} + \frac{\nu}{2} \left(\frac{dw}{dr} \right)^2 \right]. \quad (2.4)$$

Здесь u, w — радиальная и нормальная компоненты смещения срединной плоскости слоя; q — распределенная нагрузка; Δ — оператор Лапласа; E, ν — модуль Юнга и коэффициент Пуассона слоя (пластины); $T_{rr}, T_{\varphi\varphi}$ — продольные усилия в пластине; D — изгибная жесткость

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}. \quad (2.5)$$

Уравнения (2.1), (2.2) представляют собой уравнения равновесия, в первом из которых часть усилий выражена через нормальную компоненту смещения w ; уравнения (2.3), (2.4) представляют собой уравнения закона упругости, в которых деформации выражены через компоненты смещения. Область применимости системы уравнений ограничена не слишком большими прогибами w .

Для постановки задачи систему уравнений (2.1)–(2.4) необходимо дополнить граничными условиями. Традиционной является постановка, в которой смещения и углы поворота пластины в точках сопряжения с основанием полагаются равными нулю. Это условие носит название жесткой заделки и может быть представлено в виде

$$u(R) = 0, \quad (2.6)$$

$$w(R) = 0, \quad (2.7)$$

$$\left. \frac{dw(r)}{dr} \right|_{r=R} = 0. \quad (2.8)$$

Более точными являются условия упругой заделки, согласно которым кинематические величины, входящие в (2.6)–(2.8), пропорциональны некоторым статическим величинам, действующим на границе. В случае плоской границы выбор данных статических величин однозначен и определяется структурой определяющих уравнений. В общем виде это условие в используемых обозначениях можно записать в виде [14]

$$\begin{pmatrix} u(R)h^{-1} \\ -w'(R) \\ w(R)h^{-1} \end{pmatrix} = \frac{1-\nu^2}{E} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -T_{rr}h^{-1} \\ M_{rr}h^{-2} \\ Q_{rz}h^{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Здесь M_{rr}, Q_{rz} — изгибающий момент и перерезывающая сила, действующие в сечении; a_{ij} — безразмерные коэффициенты матрицы податливости, зависящие в общем случае от геометрических параметров системы (отношения толщины пластины к характерному размеру всей системы) и отношения упругих констант пластины и массивной части. Коэффициенты a_{ij} не могут быть посчитаны на основе элементарных балочных теорий. Для ряда конфигураций они были посчитаны аналитическими либо численными методами из рассмотрения более простых задач [1–14]. Условие жесткой заделки (жесткого защемления) получается из условия упругой заделки (2.9), если положить нулями все коэффициенты податливости $a_{ij} = 0$.

3. Оценки коэффициентов матрицы упругой заделки. Аналитические и численные решения

Коэффициенты матрицы упругой заделки $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}$ были получены многими авторами: численно [1; 3; 5; 9], полуаналитически [2; 8] и аналитически [7] для плоской задачи о слое, примыкающем к полуплоскости и имеющем участок отслоения. В работе [7] также были получены значения коэффициентов a_{13}, a_{23} (остальные коэффициенты не используются в рамках рассматриваемой модели). Для

достаточно протяженных отслоений, пользуясь результатами [6; 14; 15] можно получить следующие формулы:

$$\left(\begin{array}{l} a_{11} = \frac{2\sum}{\pi} \left(\ln \frac{\eta}{2\sum} + 1.57 \right) + d, \quad a_{12} = a_{21} = \sqrt{3}, \quad a_{22} = 12\delta, \\ a_{13} = 1 + \sqrt{3}\delta, \quad a_{23} = \frac{3}{2} + 6\delta^2, \quad \delta = 0.21 + 0.62\sum^{1/3}. \end{array} \right) \quad (3.1)$$

Здесь \sum — отношение модулей слоя и основания; η — отношение полудлины отслоившегося слоя к его толщине; d — константа, порядка единицы. Коэффициенты a_{ij} в данном приближении не зависят от длины пластины, кроме коэффициента a_{11} , зависящего логарифмически.

Рассматриваемая геометрия имеет два существенных отличия: наличие отверстия в основании на границе с пластиной и ненулевой радиус кривизны границы. Первое отличие должно приводить к уменьшению жесткости конструкции и, как следствие, к увеличению коэффициентов податливости. Действительно, для весьма жестких по отношению к основанию пластин область затухания напряжений в основании при удалении от точки защемления велика, поэтому при отсутствии материала основания в половине области (для плоского случая) можно ожидать до двукратного уменьшения сопротивления, и соответственно до двукратного увеличения коэффициентов податливости. В противоположном пределе (абсолютно) жесткого основания наличие отверстия не влияет на распределение напряжений, поэтому коэффициенты податливости не должны меняться. Наличие кривизны контура, очевидно, должно приводить к увеличению жесткости системы и уменьшению коэффициентов податливости. Это уменьшение должно сильно сказываться на коэффициентах, сильно зависящих от отношения протяженности пластины к толщине, и практически не сказываться на коэффициентах, слабо зависящих от этого отношения. Суммируя, для рассматриваемой конфигурации коэффициенты податливости должны несколько превосходить значения, даваемые формулой (3.1).

4. Оценки коэффициентов матрицы упругой заделки. МКЭ решение

Для получения значения коэффициентов упругой заделки решалась вспомогательная задача о полом цилиндре высотой H с внешним и внутренним радиусами R_1, R_2 , один из торцов которого $z = 0$, полностью сцеплен с пластиной из другого материала, имеющей круговое отверстие радиуса $R_3 < R_2$ (рис. 4.1). Противоположный торец цилиндра $z = -H$ жестко закреплялся, $u(r, -H) = w(r, -H) = 0$. На внутреннем контуре пластины ставились граничные условия одного из следующих видов: постоянное давление

$$\sigma_{rr}(R_3, z) = p, \quad 0 \leq z \leq h \quad (4.1)$$

либо постоянный изгибающий момент

$$\sigma_{rr}(R_3, z) = (z - h/2)p, \quad 0 \leq z \leq h. \quad (4.2)$$

Для пластины и основания были взяты модули Юнга и коэффициента Пуассона для алюминия ($E = 70$ ГПа, $\nu = 0.35$) и кремния ($E = 109$ ГПа, $\nu = 0.27$), соответственно [31].

Задача решалась методом конечных элементов в линейной упругой осесимметричной постановке.

В процессе решения вычислялись компоненты смещения на верхней и нижней свободной границе пластины $u(r, 0), u(r, h), w(r, 0), w(r, h)$, $R_3 + \xi \leq r \leq R_2 - \xi$, где параметр ξ принимался равным $3h$ для отсека областей, в которых существенную роль могут играть краевые эффекты. Значения смещений срединной плоскости вычислялись как полусумма значений в узлах сетки, расположенных на поверхностях. Полученные функции аппроксимировались полиномиальными функциями шестого порядка методом наименьших квадратов. Данные аппроксимационные зависимости экстраполировались до границы контакта пластины с цилиндром $r = R_2$. Действующие продольные усилия и моменты в данной точке вычислялись аналогичным образом через соответствующие комбинации производных от смещений. Полученные таким образом значения $u(0), w'(0), M(0), T(0)$ использовались для нахождения коэффициентов податливости. Для расчета были выбраны следующие геометрические параметры: $h = 1$, $H = 100$, $R_1 = 100$, $R_2 = 100$, для параметра R_3 использовались два значения — 60 и 40. Разница в значениях полученных коэффициентов a_{ij} при этом не превышала 3 %, что можно отнести к погрешности метода конечных элементов. Двумерная сетка строилась четырехугольными элементами. Число элементов по толщине пластины составляло 6, по длине пластины — 100, по сторонам массивной части — 200. Отношение размера элемента вблизи точки заделки и вдали от нее составляло 1/10.

Полученные значения коэффициентов податливости составили $a_{11} = 10$, $a_{12} = a_{21} = 1.7$, $a_{22} = 12$. Данные значения, согласующиеся с теоретическими значениями для плоской границы и сплошного основания, использовались в расчетах.

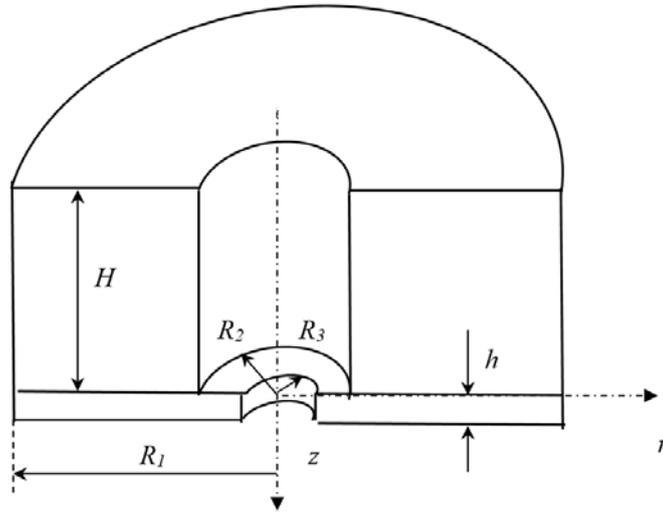


Рис. 4.1. Геометрия расчетной области
 Fig. 4.1. Geometry of the computational domain

5. Оценки влияния различных коэффициентов

Оценку удобно проводить по отдельности для отдельных коэффициентов матрицы податливости. При этом для оценки вклада того или иного коэффициента можно использовать подходящую приближенную модель, в рамках которой можно получить аналитическое либо полуаналитическое решение. Такой подход позволяет в рамках используемых приближенных теорий на основе полученных решений оценивать относительный вклад того или иного коэффициента.

5.1. Модель пластины без учета растягивающих усилий

Для оценки влияния коэффициентов, связанных с начальным поворотом, удобно использовать элементарное уравнение изгиба пластины без учета сил, возникающих в ее плоскости. Подобное уравнение обычно называют уравнением Софи Жермен. Данное уравнение может быть получено отбрасыванием в уравнении (2.1) члена, связанного с действием продольных сил

$$D\Delta^2 w = q. \quad (5.1)$$

Здесь q — распределенная нормальная нагрузка, в общем случае зависящая от координат.

В рассматриваемом случае осевой симметрии данное уравнение в полярных координатах преобразуется к виду

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dw}{dr} \right) \right) \right] = \frac{q}{D}. \quad (5.2)$$

Общее решение данного уравнения при постоянной нагрузке q , не имеющее особенностей в центре, есть

$$w(r) = \frac{qr^4}{64D} + C_1 r^2 + C_2. \quad (5.3)$$

При моделировании условий закрепления в виде жесткой заделки граничные условия записываются в виде (2.7), (2.8), при этом условие (2.6) не используется, поскольку входящая в него функция u не входит в уравнения изгиба.

При моделировании условий закрепления в виде упругой заделки условие (2.8) заменяется на следующее (с учетом знаков), являющееся частным случаем условия (2.9)

$$-\frac{dw(r)}{dr} \Big|_{r=R} = \frac{a_{22}}{\bar{E}h^2} M_{rr}(R) + \frac{a_{23}}{\bar{E}h} Q_{rz}(R). \quad (5.4)$$

Здесь модуль Юнга, модифицированный для плоской деформации, определяется как

$$\bar{E} = \frac{E}{1 - \nu^2}. \quad (5.5)$$

В условии (5.4) ввиду характера уравнения (5.1) отсутствует зависимость от продольного усилия, действующего в пластине. Кроме того, ввиду осевой симметрии вертикальное смещение края не зависит от угла и может быть положено равным нулю.

Значение изгибающего момента может быть посчитано следующим образом [30]:

$$M_{rr}(r) = D \left(\frac{d^2 w(r)}{dr^2} + \frac{\nu}{r} \frac{dw(r)}{dr} \right). \quad (5.6)$$

Значение перерезывающей силы наиболее просто получить из баланса сил, действующих на пластину в пределах радиуса

$$Q_{rz}(r) = \frac{qr}{2}. \quad (5.7)$$

С учетом (5.6), (5.7) граничное условие (5.4) записывается в виде

$$\left. \frac{dw(r)}{dr} \right|_{r=R} = -\frac{h}{12} a_{22} \left(\left. \frac{d^2 w(r)}{dr^2} \right|_{r=R} + \frac{\nu}{R} \left. \frac{dw(r)}{dr} \right|_{r=R} \right) - \frac{a_{23}}{2} \frac{qR}{Eh}. \quad (5.8)$$

Подстановка общего решения (5.3) в граничное условие упругой заделки (5.8) дает уравнение для определения константы C_1

$$\frac{qR^3}{16D} + 2C_1 R = -\frac{h}{12} a_{22} \left(\frac{(3+\nu)qR^2}{16D} + 2(1+\nu)C_1 \right) - \frac{a_{23}}{2} \frac{qR}{Eh}. \quad (5.9)$$

Откуда

$$C_1 = -\frac{qR^2}{32D} \left(1 + \frac{3+\nu}{12} a_{22} \frac{h}{R} + a_{23} \frac{2}{3} \frac{h^2}{R^2} \right) \left(1 + \frac{h}{12R} a_{22} (1+\nu) \right)^{-1}. \quad (5.10)$$

После чего из (2.7) находится константа C_2

$$C_2 = -\frac{qR^4}{64D} - C_1 R^2. \quad (5.11)$$

Подстановка значений констант (5.10), (5.11) в общее решение окончательно дает выражение для смещений в случае граничных условий в виде упругой заделки

$$w(r) = \frac{qr^4}{64D} - \frac{qR^2}{32D} (r^2 - R^2) \left(1 + \frac{3+\nu}{12} a_{22} \frac{h}{R} + a_{23} \frac{2}{3} \frac{h^2}{R^2} \right) \left(1 + \frac{h}{12R} a_{22} (1+\nu) \right)^{-1} - \frac{qR^4}{64D}. \quad (5.12)$$

Выражение для смещений в случае граничных условий в виде жесткой заделки получается отсюда, если положить $a_{22} = a_{23} = 0$, либо подстановкой граничных условий (2.7), (2.8) в общее решение (5.3)

$$w(r) = \frac{q}{64D} (R^2 - r^2)^2. \quad (5.13)$$

Ввиду малости параметра h/R оценки для поправки, вносимой учетом конечности поворота в месте заделки, решение (5.12) можно разложить в ряд по данному параметру. Тогда, в частности, для смещения в центре пластины

$$w(0) = \frac{qR^4}{64D} \left(1 + \frac{1}{3} a_{22} \frac{h}{R} \right) + O\left(\frac{h}{R}\right)^2. \quad (5.14)$$

При $h/R = 1/100$ для пленки алюминия на кремнии с $a_{22} \approx 12$ погрешность, вносимая неучетом конечности поворота, составляет около 4 %, для $h/R = 1/1000$ погрешность становится пренебрежимо малой. Вклад от коэффициента a_{23} для указанных условий пренебрежим ввиду того, что параметр h/R входит во второй степени.

Аналогично для величины момента в точке заделки, согласно (5.6)

$$M_{rr}(R) = \frac{qR^2}{8D} \left(1 - \frac{1+\nu}{12} a_{22} \frac{h}{R} \right). \quad (5.15)$$

Поправка для рассматриваемых условий составляет порядка 1 %. Однако при меньших относительных радиусах рассматриваемая поправка становится существенной.

Уравнения (5.14), (5.15) показывают, что податливость заделки приводит к увеличению нормальных смещений и уменьшению изгибающего момента, соответствующие поправки имеют порядок $a_{22} \frac{h}{R}$ и обусловлены вкладом члена, соответствующего влиянию изгибающего момента на угол поворота в месте контакта.

5.2. Мембранная модель

Рассмотрим другой крайний случай преобладания продольных (мембранных) усилий. При этом обычно предполагается постоянство усилий

$$T_{rr}(r) = \text{const.} \quad (5.16)$$

Из предположения (5.16) и уравнения равновесия (2.2) также следует равенство мембранных усилий в различных направлениях $T_{rr} = T_{\varphi\varphi} = T$. Предположение постоянства мембранных усилий не позволяет удовлетворить точно уравнениям совместности, однако используется в приближенных расчетах. Уравнение для прогиба получается из общего уравнения (2.1) отбрасыванием первого члена, связанного с изгибом, что вместе с условием (5.16) дает

$$-T\Delta w(r) = q \quad (5.17)$$

или в полярных координатах:

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dw}{dr} \right) = \frac{q}{T}. \quad (5.18)$$

Решение, удовлетворяющее граничному условию отсутствия вертикальных смещений на границе (2.7) и ограниченное в нуле, есть

$$w(r) = \frac{q}{4T} (R^2 - r^2). \quad (5.19)$$

Данное решение, очевидно, неадекватно описывает поведение вблизи точек заделки. В частности, решение (5.19) дает конечный (и достаточно большой) поворот в этой точке. Это связано с тем, что вблизи заделки пренебрежение изгибными напряжениями, описываемыми в уравнении (2.1) старшими производными, становится неправомерным; для адекватного описания деформирования в этой области в рамках мембранной теории необходимо рассмотрение пограничного слоя.

Радиальные T_{rr} и окружные мембранные усилия $T_{\varphi\varphi}$ находятся из закона упругости. В предположении постоянства мембранных усилий получаем

$$\varepsilon_{rr} = \frac{T_{rr}}{Eh} - \nu \frac{T_{\varphi\varphi}}{Eh} = \frac{1-\nu}{Eh} T, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{T_{\varphi\varphi}}{Eh} - \nu \frac{T_{rr}}{Eh} = \frac{1-\nu}{Eh} T. \quad (5.20)$$

Выражения для радиальных и окружных деформаций ε_{rr} , $\varepsilon_{\varphi\varphi}$ через смещения u , w имеют вид

$$\varepsilon_{rr} = \frac{du}{dr} + \frac{1}{2} \left(\frac{dw}{dr} \right)^2, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u}{r}. \quad (5.21)$$

Подстановка (5.21) в (5.20) дает различные выражения для смещения $u(R)$ при подсчете через радиальную и окружную деформации. В первом случае интегрирование от 0 до R дает

$$u(R) = \frac{1-\nu}{Eh} TR - \frac{1}{2} \int_0^R \left(\frac{dw}{dr} \right)^2 dr, \quad (5.22)$$

во втором

$$u(R) = \frac{1-\nu}{Eh} TR. \quad (5.23)$$

Для дальнейших расчетов возьмем среднее значение

$$u(R) = \frac{1-\nu}{Eh} TR - \frac{1}{4} \int_0^R \left(\frac{dw}{dr} \right)^2 dr. \quad (5.24)$$

Подстановка (5.19) в (5.24) и интегрирование от 0 до R дают

$$u(R) = \frac{1-\nu}{E} \frac{R}{h} T - \frac{q^2 R^3}{48T^2}. \quad (5.25)$$

С другой стороны смещение $u(R)$ может быть посчитано через граничное условие типа упругой заделки (получающегося как частный случай из первого из условий (2.9)):

$$u(R) = -\frac{a_{11}}{E} T. \quad (5.26)$$

Здесь отсутствуют члены, связанные с высшими производными от w (см. рассуждения после формулы (5.19)). Из сравнения (5.26) и (5.25) получаем

$$T^3 = \frac{Eq^2 R^2 h}{48(1-\nu)} \left(1 + a_{11} (1+\nu) \frac{h}{R} \right)^{-1}. \quad (5.27)$$

Откуда для малых h/R

$$T = \sqrt[3]{\frac{Eq^2R^2h}{48(1-\nu)}} \left(1 - a_{11} \frac{1+\nu}{3} \frac{h}{R} \right) + O\left(\frac{h}{R}\right)^2. \quad (5.28)$$

Подстановка выражения для T в выражение для нормального смещения w (5.19), для смещения в центре пластины дает

$$w(r) = \frac{1}{2} (R^2 - r^2) \sqrt[3]{\frac{6q(1-\nu)}{EhR^2}} \left(1 + a_{11} \frac{1+\nu}{3} \frac{h}{R} \right) + O\left(\frac{h}{R}\right)^2, \quad (5.29)$$

$$w(0) = \frac{R}{2} \sqrt[3]{\frac{6qR(1-\nu)}{Eh}} \left(1 + a_{11} \frac{1+\nu}{3} \frac{h}{R} \right) + O\left(\frac{h}{R}\right)^2. \quad (5.30)$$

Из данных уравнений видно, что относительная поправка, вносимая за счет учета податливости заделки, имеет порядок $a_{11} \frac{h}{R}$. Для рассмотренной мембранной модели она не зависит от величины действующей нагрузки q . Поправка величины смещения и натяжения для $h/R = 1/100$ составляет порядка 1.3 %. Однако при меньших относительных радиусах рассматриваемая поправка становится существенной.

5.3. Модель Фешля — фон Кармана в приближении постоянства усилий в плоскости пластины

Данная модель, не являясь точной, позволяет тем не менее получить оценки влияния всех коэффициентов матрицы податливости. Уравнение (2.1) для постоянных мембранных усилий $T_{rr} = T_{\varphi\varphi} = T$ в полярных координатах записывается как

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dw}{dr} \right) \right) \right] - \frac{T}{D} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dw}{dr} \right) = \frac{q}{D}. \quad (5.31)$$

Решение данного уравнения, не имеющее особенности в нуле и удовлетворяющее граничному условию отсутствия вертикальных смещений на контуре (2.7), записывается в виде

$$w(r) = \frac{q(R^2 - r^2)}{4T} + C \left[I_0 \left(\frac{r\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) - I_0 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right]. \quad (5.32)$$

Первая и вторая производные от вертикального смещения есть

$$w'(r) = -\frac{qr}{2T} + C \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{D}} I_1 \left(\frac{r\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right), \quad (5.33)$$

$$w''(r) = -\frac{q}{2T} + C \frac{T}{2D} \left[I_0 \left(\frac{r\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) + I_2 \left(\frac{r\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right]. \quad (5.34)$$

Здесь I_k — модифицированная функция Бесселя (функция Инфельда) порядка k . Постоянная интегрирования C и величина натяжения T находятся из оставшихся граничных условий (2.9), записываемых в виде

$$u(R) = -\frac{a_{11}}{E} T + \frac{a_{12}}{Eh} M + \frac{a_{13}}{E} Q_{rz}, \quad (5.35)$$

$$-w'(R) = -\frac{a_{21}}{Eh} T + \frac{a_{22}}{Eh^2} M + \frac{a_{23}}{Eh} Q_{rz}. \quad (5.36)$$

С другой стороны, подстановка выражения для производной нормальных смещений (5.33) в выражение (5.22) и интегрирование от 0 до R дают (здесь, подобно мембранному приближению, для вычисления мембранных усилий T берется среднее значение осевых и окружных деформаций)

$$u(R) = \frac{1-\nu}{E} \frac{R}{h} T - u_w, \quad (5.37)$$

$$u_w = \frac{R^3 \left(C^2 T^4 {}_2F_3 \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2, \frac{5}{2}, 3; \frac{R^2 T}{D} \right) + Dq \left(Dq - 2CT^2 {}_1F_2 \left(\frac{3}{2}; 2, \frac{5}{2}; \frac{R^2 T}{4D} \right) \right) \right)}{24D^2 T^2}. \quad (5.38)$$

Здесь u_w — член, возникающий за счет вклада в деформацию квадрата производной от вертикальных смещений; ${}_m F_n$ — гипергеометрическая функция.

Подстановка выражений для силовых параметров (5.6), (5.7), в выражения для смещения на краю пластины (5.25) и производной от нормальных смещений (5.33) приводят к системе двух нелинейных уравнений для определения величин C и T

$$\frac{1-\nu}{E} \frac{R}{h} T - u_w = -\frac{a_{11}}{E} T + \frac{a_{13}}{E} \frac{qR}{2} + \frac{a_{12}h^2}{12} \left\{ -\frac{q}{2T} + C \frac{T}{2D} \left[I_0 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) + I_2 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right] + \frac{\nu}{R} \left[-\frac{q}{2T} + C \frac{T}{2D} \left(I_0 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) + I_2 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right) \right] \right\}, \quad (5.39)$$

$$\frac{qR}{2T} - C \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{D}} I_1 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) = -\frac{a_{21}}{Eh} T + \frac{a_{23}}{Eh} \frac{qR}{2} + \frac{a_{22}h}{12} \left\{ -\frac{q}{2T} + C \frac{T}{2D} \left[I_0 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) + I_2 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right] + \frac{\nu}{R} \left[-\frac{q}{2T} + C \frac{T}{2D} \left(I_0 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) + I_2 \left(\frac{R\sqrt{T}}{\sqrt{D}} \right) \right) \right] \right\}. \quad (5.40)$$

Условие жесткого защемления получается из (5.39), (5.40) обнулением коэффициентов податливости $a_{ij} = 0$, однако даже при этом получившаяся система не позволяет получить аналитическое решение.

5.4. Некоторые численные оценки для модели Фешля — фон Кармана в приближении постоянства усилий в плоскости пластины

Расчеты проводились для пластины алюминия на кремниевом основании. Постановка данной задачи обусловлена ее интересом при идентификации экспериментально определяемых параметров ультратонких элементов МЭМС, используемых в проекционных литографических системах [24–28]. Значения модуля Юнга и коэффициенты Пуассона для пластины принимались $E = 70$ ГПа, $\nu = 0.35$ соответственно [31]. Значения коэффициентов податливости, посчитанные методом конечных элементов, принимались равными $a_{11}^0 = 10$, $a_{12}^0 = a_{21}^0 = 1.7$, $a_{22}^0 = 12$ (вклад в расчетные величины за счет коэффициентов a_{13} , a_{23} оказался порядка сотых долей процента, поэтому в окончательных расчетах их значение принималось равным нулю $a_{13} = a_{23} = 0$). Отношение толщины пластины к радиусу в расчетах составляло $h/R = 1/R$.

Значения величин прогиба в центре пластины w , момента на краю пластины M и величины растягивающего усилия T были посчитаны для указанных значений параметров и различных величин давления q согласно формулам (5.6), (5.32) и результатам численного решения системы (5.39), (5.40). Обнуление одного или нескольких оставшихся коэффициентов податливости позволило также проводить расчеты по редуцированным моделям, вплоть до модели жесткой заделки. Результаты расчетов представлены в табл. 5.1. Величины w_0 , M_0 , T_0 относятся к жесткой заделке.

Приведенные расчеты свидетельствуют о том, что влияние коэффициентов податливости разнаправлено и существенно зависит от уровня внешней нагрузки. Анализ полученных данных позволяет сделать следующие выводы о влиянии коэффициентов податливости для рассматриваемой геометрии и сочетании упругих свойств:

1. Пренебрежение влиянием коэффициента a_{11} приводит к занижению значений прогиба пластины и изгибающего момента на краю (тем большим, чем больше нагрузка) и завышению значений растягивающих усилий (тем большим, чем меньше нагрузка).
2. Пренебрежение влиянием коэффициента a_{12} приводит к незначительному (менее 1 %) завышению значений прогиба пластины, завышению значений изгибающего момента на краю при малых нагрузках и занижению при больших, и занижению значений растягивающих усилий (тем большим, чем меньше нагрузка). В целом данный коэффициент оказывает наименьшее влияние на исследуемые величины. Его вклад наиболее существенен на изгибающий момент при больших нагрузках и на величину продольной силы при малых нагрузках, однако даже в этих случаях его вклад имеет порядок 2.5 и 5 %, соответственно.
3. Пренебрежение влиянием коэффициента a_{22} приводит к занижению значений прогиба пластины (тем большим, чем больше нагрузка), к завышению значений изгибающего момента на краю (тем большим, чем больше нагрузка), а также к занижению значений растягивающих усилий (тем большим, чем меньше нагрузка). Влияние данного коэффициента становится весьма существенным при расчете величины изгибающего момента на краю пластины при действии больших нагрузок.
4. Сравнение результатов, полученных в рамках модели упругой заделки с учетом всех трех коэффициентов, с результатами для жесткой модели показывает, что пренебрежение податливостью приводит к занижению значений прогиба тем большим, чем больше нагрузка, однако не превышающим 4.2 %, завышению значения изгибающего момента на краю, доходящего до 12.6 % при нагрузках, соответствующих прогибам порядка 7.5 толщин пластины, и завышению значений растягивающих усилий (тем большим, чем больше нагрузка).

Таблица 5.1

Значения величин прогиба в центре пластины, продольного усилия и изгибающего момента на краю пластины при учете различных коэффициентов податливости

Table 5.1

Values of deflections in the plate center, longitudinal stresses and bending moments at the plate edge due to accounting for various coefficients of compliance

$\frac{p}{E}$	a_{11}	a_{12}	a_{22}	$\frac{w}{h}$	$\frac{w-w_0}{w} \cdot 100 \%$	$\frac{M}{ph^2R}$	$\frac{M-M_0}{M} \cdot 100 \%$	$\frac{T}{phR}$	$\frac{T-T_0}{T} \cdot 100 \%$
$5 \cdot 10^{-8}$	0	0	0	0.703		11.39		4.64	
	a_{11}^0	0	0	0.712	1.37	11.49	0.8	4.20	-10.4
	0	a_{12}^0	0	0.697	-0.82	11.37	-0.23	4.83	3.91
	0	0	a_{22}^0	0.724	2.81	11.13	-2.35	4.87	4.69
	a_{11}^0	0	a_{22}^0	0.734	4.2	11.23	-1.46	4.41	-5.09
	a_{11}^0	a_{12}^0	a_{22}^0	0.729	3.5	11.2	-1.7	4.58	-0.13
10^{-7}	0	0	0	1.138		10.10		6.08	
	a_{11}^0	0	0	1.165	2.35	10.24	1.32	5.62	-8.24
	0	a_{12}^0	0	1.127	-0.93	10.01	-0.12	6.20	2.01
	0	0	a_{22}^0	1.163	2.13	9.78	-3.29	6.29	3.37
	a_{11}^0	0	a_{22}^0	1.192	4.49	9.92	-1.84	5.82	-4.47
	a_{11}^0	a_{12}^0	a_{22}^0	1.181	3.69	9.91	-1.95	5.92	-2.56
10^{-6}	0	0	0	3.336		5.379		5.35	
	a_{11}^0	0	0	3.469	3.83	5.483	1.89	5.1	-5.10
	0	a_{12}^0	0	3.306	-0.89	5.421	0.78	5.39	0.69
	0	0	a_{22}^0	3.372	1.08	4.977	-8.07	5.44	1.43
	a_{11}^0	0	a_{22}^0	3.507	4.88	5.081	-5.84	5.17	-3.57
	a_{11}^0	a_{12}^0	a_{22}^0	3.481	4.15	5.119	-5.07	5.20	-2.96
10^{-5}	0	0	0	7.622		2.622		2.89	
	a_{11}^0	0	0	7.944	4.05	2.676	2.0	2.77	-4.55
	0	a_{12}^0	0	7.556	-0.87	2.687	-2.41	2.91	0.57
	0	0	a_{22}^0	7.685	0.82	2.223	-17.9	2.92	1.04
	a_{11}^0	0	a_{22}^0	8.01	4.85	2.276	-15.2	2.79	-3.54
	a_{11}^0	a_{12}^0	a_{22}^0	7.957	4.21	2.328	-12.6	2.81	-3.01

Полученные значения вклада податливости в величины прогиба и изгибающего момента для нагрузок, соответствующих малым прогибам, близки к значениям, полученным с использованием уравнения Софи Жермен. Для нагрузок, соответствующих прогибам, равным нескольким толщинам, различие увеличивается, особенно для изгибающих моментов. Полученные значения величин натяжения существенно отличаются от величин, посчитанных в рамках мембранной теории.

Следует отметить, что вычислительные трудности при расчетах с использованием редуцированных моделей сопоставимы со случаем использования полной модели, поэтому для практических целей можно рекомендовать использование именно полной модели во всех случаях.

Заключение

Рассмотрена задача о деформировании круговой пластины, сопряженной с массивным основанием, под действием приложенного давления. Для моделирования сопряжения пластины с основанием используются граничные условия типа обобщенной упругой заделки, т. е. линейной связи изгибающего момента и усилий на краю пластины со смещениями и углом поворота посредством матрицы податливости. Решение задачи получено для трех вариантов теории пластин:

- линейной теории, не учитывающей действия продольных усилий;
- теории мембран в приближении предположения однородности продольных усилий;
- теории Фешля — фон Кармана также в приближении предположения однородности продольных усилий.

Значения коэффициентов матрицы податливости были получены с помощью метода конечных элементов для вспомогательной задачи о сцепленной с массивным основанием пластине с цилиндрическим

отверстием, края которого нагружены продольными усилиями либо изгибающим моментом. Численные результаты получены для пластины из алюминия на кремниевом основании — задачи, возникающей при идентификации параметров ультратонких элементов МЭМС, используемых в проекционных литографических системах.

Проведено сравнение величин прогиба в центре пластины, растягивающего усилия и изгибающего момента на краю пластины, полученных из решений, учитывающих и не учитывающих упругость заделки. Исследована роль отдельных коэффициентов матрицы податливости. Показано, что для больших прогибов наиболее существенную роль играет коэффициент, связывающий угол поворота пластины в точке заделки с действующим изгибающим моментом. Показано, что для нагружения, соответствующего прогибам в несколько толщин пластины (нескольких процентов от ее радиуса), разница в значениях изгибающего момента на ее краю, посчитанная с учетом и без учета податливости заделки, превышает 10 %, что свидетельствует о необходимости учета податливости заделки.

Авторы выражают признательность С.А. Лычеву и А.В. Дигилову за ряд полезных замечаний, выраженных в процессе обсуждения работы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ, проект № 23 – 19 – 00866 (для КБУ).

Литература

- [1] Cotterell B., Chen Z. Buckling and cracking of thin film on compliant substrates under compression // *International Journal of Fracture*. 2000. Vol. 104, Issue 2. Pp. 169–179. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1007628800620>.
- [2] Yu H.-H., Hutchinson J.W. Influence of substrate compliance on buckling delamination of thin films // *International Journal of Fracture*. 2002. Vol. 113. Pp. 39–55. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1013790232359>.
- [3] Li S., Wang J., Thouless M.D. The effects of shear on delamination in layered materials // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2004. Vol. 52, Issue 1. Pp. 193–214. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(03\)00070-X](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(03)00070-X).
- [4] Andrews M., Massabo R., Cox B. Elastic interaction of multiple delaminations in plates subject to cylindrical bending // *International Journal of Solids and Structures*. 2006. Vol. 43, Issue 5. Pp. 855–886. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2005.04.025>.
- [5] Andrews M., Massabo R. The effects of shear and near tip deformations on energy release rate and mode mixity of edge-cracked orthotropic layers // *Engineering Fracture Mechanics*. 2007. Vol. 74, Issue 17. Pp. 2700–2720. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2007.01.013>.
- [6] Ustinov K.B. On shear separation of a thin strip from the half-plane // *Mechanics of Solids*. 2014. Vol. 49, Issue 6. Pp. 713–724. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0025654414060132>.
- [7] Ustinov K.B. On separation of a layer from the half-plane: elastic fixation conditions for a plate equivalent to the layer // *Mechanics of Solids*. 2015. Vol. 50, Issue 1. Pp. 62–80. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0025654415010070>.
- [8] Begley M.R., Hutchinson J.W. *The Mechanics and Reliability of Films, Multilayers and Coatings*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. 288 p. DOI: <https://doi.org/10.1017/9781316443606>.
- [9] Thouless M.D. Shear forces, root rotations, phase angles and delamination of layered materials // *Engineering Fracture Mechanics*. 2018. Vol. 191. Pp. 153–167. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2018.01.033>.
- [10] Barbieri L., Massabo R., Berggreen C. The effects of shear and near tip deformations on interface fracture of symmetric sandwich beams // *Engineering Fracture Mechanics*. 2018. Vol. 201. Pp. 298–321. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2018.06.039>.
- [11] Massabo R., Ustinov K.B., Barbieri L., Berggreen C. Fracture mechanics solutions for interfacial cracks between compressible thin layers and substrates // *Coatings*. 2019. Vol. 9, Issue 3. P. 152. DOI: <https://doi.org/10.3390/coatings9030152>.
- [12] Ustinov K.B. On semi-infinite interface crack in bi-material elastic layer // *European Journal of Mechanics – A/Solids*. 2019. Vol. 75. Pp. 56–69. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2019.01.013>.
- [13] Monetto I., Massabo R. An analytical beam model for the evaluation of crack tip root rotations and displacements in orthotropic specimens // *Frattura ed Integrità Strutturale*. 2020. Vol. 14, No. 53. Pp. 372–393. DOI: <https://doi.org/10.3221/IGF-ESIS.53.29>.
- [14] Ustinov K., Massabo R. On elastic clamping boundary conditions in plate models describing detaching bilayers // *International Journal of Solids and Structures*. 2022. Vol. 248. P. 111600. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2022.111600>.
- [15] Ustinov K.B. On influence of substrate compliance on delamination and buckling of coatings // *Engineering Failure Analysis*. 2015. Vol. 47. Pp. 338–344. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2013.09.022>
- [16] Вольмир А.С. *Устойчивость деформируемых систем*. Москва: Наука, 1967. 984 с. URL: <https://dwg.ru/dnl/4808?ysclid=lsmpvbywto225676829>.

- [17] Бауэр С.М., Воронкова Е.Б. Влияние условий закрепления на появление несимметричных форм равновесия у круглых пластин под действием нормального давления // Журнал Белорусского государственного университета. Сер.: Математика. Информатика. 2020. № 1. С. 38–46. DOI: <http://doi.org/10.33581/2520-6508-2020-1-38-46>.
- [18] Vogt F. *Über die Berechnung der Fundamentdeformation* Avhandlingar utgitt av det Norske Videnskaps. Akademi i Oslo: Matematisk-naturvidenskapelig klasse. 1925. 35 p.
- [19] Weber C. *The Deformation of Loaded Gears and the Effect on Their Load Carrying Capacity* // Department of Scientific and Industrial Research, Sponsored Research, Germany. Report 3, Part I, England. 1949.
- [20] O'Donnell W.J. *The additional deflection of a cantilever due to the elasticity of the support* // Journal of the Applied Mechanics. 1960. Vol. 27, Issue 3. Pp. 461–464. DOI: <http://doi.org/10.1115/1.3644025>.
- [21] O'Donnell W.J. *Stresses and Deflection in Built-Up Beams*. // Journal of Engineering for Industry. 1963. Vol. 85, № 3. Pp. 265–273. DOI: <http://doi.org/10.1115/1.3669856>.
- [22] Brown J.M., Hall A.S. *Bending Deflection of a Circular Shaft Terminating in a Semi-Infinite Body*. // Journal of Applied Mechanics. 1962. Vol. 29, Issue 1. Pp. 86–90. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.3636503>.
- [23] Small N.C. *Bending of a Cantilever Plate Supported From an Elastic Half Space* // Journal of Applied Mechanics. 1961. Vol. 28. Pp. 387–394.
- [24] *Nanofabrication: Nanolithography techniques and their applications*. Editor Jose Maria De Teresa. Bristol, England: IOP Publishing Ltd. 2020. 450 p. DOI: <http://doi.org/10.1088/978-0-7503-2608-7>.
- [25] Салашенко Н.Н., Чхало Н.И., Дюжев Н.А. Безмасочная рентгеновская литография на основе МОЭМС и микрофокусных рентгеновских трубок // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2018. № 10. С. 10–20. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0207352818100165>. EDN: <https://www.elibrary.ru/ytmftet>.
- [26] Silverman J.P. *Challenges and progress in X-ray lithography* // Journal of Vacuum Science & Technology B. 1998. Vol. 16, Issue 6. Pp. 31–37. DOI: <https://doi.org/10.1116/1.590452>.
- [27] Vladimirsky Y., Bourdillon A., et al. *Demagnification in proximity X-ray lithography and extensibility to 25 nm by optimizing Fresnel diffraction* // Journal of Physics D: Applied Physics. 1999. Vol. 32, Issue 22. Pp. 114–118. DOI: <http://doi.org/10.1088/0022-3727/32/22/102>.
- [28] Cheng Y.L., Li M.L., Lin J.H., Lai J.H., Ke C.T., and Huang Y.C. *Development of dynamic mask photolithography system* // Proceedings of the IEEE International Conference on Mechatronics (ICM'05). 2005. Pp. 467–471. DOI: <http://doi.org/10.1109/ICMECH.2005.1529302>.
- [29] Лычев С.А., Дигилов А.В., Пивоваров Н.А. Изгиб кругового диска. От цилиндра к ультратонкой мембране // Вестник Самарского университета. Естественная серия. 2023. Т. 29, № 4. С. 77–105. DOI: <https://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-77-105>. EDN: <https://www.elibrary.ru/blerei>.
- [30] Тимошенко С.П., Войновский-Кригер С. *Пластинки и оболочки*. Москва: Государственное издательство физико-математической литературы. 1963. 635 с. URL: [https://dl.booksee.org/genesis/794000/f679d6f7228f673194bd1e69961a5405/_as/\[S._P._TIMOSHENKO_i_S._VOINOVSKY-KRIGER\]_Voinovsky\(BookSee.org\).pdf](https://dl.booksee.org/genesis/794000/f679d6f7228f673194bd1e69961a5405/_as/[S._P._TIMOSHENKO_i_S._VOINOVSKY-KRIGER]_Voinovsky(BookSee.org).pdf).
- [31] Анурьев В.И. *Справочник конструктора-машиностроителя: в 3 т. Т. 1* / В.И. Анурьев; 8-е изд., перераб и доп.; под ред. И.Н. Жестковой. Москва: Машиностроение. 2001. 34 с. URL: <https://www.servotechnica.spb.ru/library/BOOKS/Anurev?ysclid=lsmzst00yj406639767>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-50-63

Submitted: 15.01.2024

Revised: 21.02.2024

Accepted: 28.02.2024

K.B. Ustinov

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russian Federation
E-mail: ustinov@ipmnet.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5852-3355>

D.V. Gandilyan

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russian Federation
E-mail: david.ghandilyan@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-8469-4380>

ON THE BOUNDARY CONDITIONS FOR A THIN CIRCULAR PLATE CONJUGATED TO A MASSIVE BODY

ABSTRACT

The problem of deformation under the action of uniform pressure of a circular plate coupled with a massive base is considered, while the condition for the coupling of the plate with the base is modeled using boundary conditions of the generalized elastic embedding type, i.e. the relationship between the bending moment and forces at the edge of the plate with displacements and rotation angles through the compliance matrix. The main goal of the work is to study the influence of the elasticity of the embedding on the elastic response of the plate. The solution to the problem was obtained in the formulation of the linear theory of plates, the theory of membranes in the approximation of homogeneity of longitudinal forces, and the Foppl — von Karman theory, also in the approximation of the assumption of homogeneity of longitudinal forces. The values of the coefficients of the compliance matrix were obtained using the finite element method for the auxiliary problem and compared with the values of the coefficients obtained for related problems by analytical methods. Numerical results were obtained for an aluminum wafer on a silicon base. The obtained solution was compared with the solution obtained for the rigid embedment condition for all three models used. It is shown that in the case of large deflections (several plate thicknesses), taking into account the compliance of the embedment becomes essential.

Key words: thin plate; boundary conditions for plates; elastic embedding; compliance matrix.

Citation. Ustinov K.B., Gandilyan D.V. On the boundary conditions for a thin circular plate conjugated to a massive body. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 50–63. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-50-63>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Ustinov K.B., Gandilyan D.V., 2024

Konstantin B. Ustinov — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, associate professor, leading researcher, Laboratory of Geomechanics, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences, 101-1, Prospect Vernadskogo, Moscow, 119526, Russian Federation.

David V. Gandilyan — postgraduate student, junior researcher, Laboratory of Mechanics of Technological Processes, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences, 101-1, Prospect Vernadskogo, Moscow, 119526, Russian Federation.

References

- [1] Cotterell B., Chen Z. Buckling and cracking of thin film on compliant substrates under compression. *International Journal of Fracture*, 2000, vol. 104, issue 2, pp. 169–179. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1007628800620>.
- [2] Yu H.-H., Hutchinson J.W. Influence of substrate compliance on buckling delamination of thin films. *International Journal of Fracture*, 2002, vol. 113, pp. 39–55. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1013790232359>.
- [3] Li S., Wang J., Thouless M.D. The effects of shear on delamination in layered materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2004, vol. 52, issue 1, pp. 193–214. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(03\)00070-X](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(03)00070-X).
- [4] Andrews M., Massabo R., Cox B. Elastic interaction of multiple delaminations in plates subject to cylindrical bending. *International Journal of Solids and Structures*, 2006, vol. 43, issue 5, pp. 855–886. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2005.04.025>.
- [5] Andrews M., Massabo R. The effects of shear and near tip deformations on energy release rate and mode mixity of edge-cracked orthotropic layers. *Engineering Fracture Mechanics*, 2007, vol. 74, issue 17, pp. 2700–2720. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2007.01.013>.
- [6] Ustinov K.B. On shear separation of a thin strip from the half-plane. *Mechanics of Solids*, 2014, vol. 49, issue 6, pp. 713–724. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0025654414060132>.
- [7] Ustinov K.B. On separation of a layer from the half-plane: elastic fixation conditions for a plate equivalent to the layer. *Mechanics of Solids*, 2015, vol. 50, issue 1, pp. 62–80. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0025654415010070>.
- [8] Begley M.R., Hutchinson J.W. *The Mechanics and Reliability of Films, Multilayers and Coatings*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017, 288 p. DOI: <https://doi.org/10.1017/9781316443606>.
- [9] Thouless M.D. Shear forces, root rotations, phase angles and delamination of layered materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 2018, vol. 191, pp. 153–167. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2018.01.033>.
- [10] Barbieri L., Massabo R., Berggreen C. The effects of shear and near tip deformations on interface fracture of symmetric sandwich beams. *Engineering Fracture Mechanics*, 2018, vol. 201, pp. 298–321. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2018.06.039>.

- [11] Massabo R., Ustinov K.B., Barbieri L., Berggreen C. Fracture mechanics solutions for interfacial cracks between compressible thin layers and substrates. *Coatings*, 2019, vol. 9, issue 3, p. 152. DOI: <https://doi.org/10.3390/coatings9030152>.
- [12] Ustinov K.B. On semi-infinite interface crack in bi-material elastic layer. *European Journal of Mechanics – A/Solids*, 2019, vol. 75, pp. 56–69. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2019.01.013>.
- [13] Monetto I., Massabo R. An analytical beam model for the evaluation of crack tip root rotations and displacements in orthotropic specimens. *Frattura ed Integrità Strutturale*, 2020, vol. 14, no. 53, pp. 372–393. DOI: <https://doi.org/10.3221/IGF-ESIS.53.29>.
- [14] Ustinov K., Massabo R. On elastic clamping boundary conditions in plate models describing detaching bilayers. *International Journal of Solids and Structures*, 2022, vol. 248, p. 111600. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2022.111600>.
- [15] Ustinov K.B. On influence of substrate compliance on delamination and buckling of coatings. *Engineering Failure Analysis*, 2015, vol. 47, pp. 338–344. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2013.09.022>.
- [16] Volmir A.S. Stability of deformable systems. Moscow: Nauka, 1967, 984 p. Available at: <https://dwg.ru/dnl/4808?ysclid=ismvpywto225676829>. (In Russ.)
- [17] Bauer S.M., Voronkova E.B. Influence of boundary constraints on the appearance of asymmetrical equilibrium states in circular plates under normal pressure. *Journal of the Belarusian State University. Mathematics and Informatics*, 2020, no. 1, pp. 38–46. DOI: <https://doi.org/10.33581/2520-6508-2020-1-38-46>. (In Russ.)
- [18] Vogt F. Über die Berechnung der Fundamentdeformation Avhandling utgitt av det Norske Videnskaps. Akademi i Oslo: Matematisk-naturvidenskapelig klasse, 1925, 35 p.
- [19] Weber C. The Deformation of Loaded Gears and the Effect on Their Load Carrying Capacity // Department of Scientific and Industrial Research, Sponsored Research, Germany. Report 3, Part I, England. 1949.
- [20] O'Donnell W.J. The additional deflection of a cantilever due to the elasticity of the support. *Journal of the Applied Mechanics*, 1960, vol. 27, issue 3, pp. 461–464. DOI: <http://doi.org/10.1115/1.3644025>.
- [21] O'Donnell W.J. Stresses and deflection in built-up beams. *Journal of Engineering for Industry*, 1963, vol. 85, no. 3, pp. 265–273. DOI: <http://doi.org/10.1115/1.3669856>.
- [22] Brown J.M., Hall A.S. Bending deflection of a circular shaft terminating in a semi-infinite body. *Journal of Applied Mechanics*, 1962, vol. 29, issue 1, pp. 86–90. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.3636503>.
- [23] Small N.C. Bending of a Cantilever Plate Supported From an Elastic Half Space. *Journal of Applied Mechanics*, 1961, vol. 28, pp. 387–394.
- [24] Jose Maria De Teresa (Ed.) Nanofabrication: Nanolithography techniques and their applications. Bristol, England: IOP Publishing Ltd. 2020. 450 p. DOI: <http://doi.org/10.1088/978-0-7503-2608-7>.
- [25] Salashchenko N.N., Chkhalo N.I., Dyuzhev N.A. Maskless X-Ray Lithography Based on Moems and Microfocus X-Ray Tubes. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2018, no. 10, pp. 10–20. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0207352818100165>. EDN: <https://www.elibrary.ru/ymtfet>. (In Russ.)
- [26] Silverman J.P. Challenges and progress in X-ray lithography. *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 1998, vol. 16, issue 6, pp. 31–37. DOI: <https://doi.org/10.1116/1.590452>.
- [27] Vladimírsky Y., Bourdillon A., et al. Demagnification in proximity X-ray lithography and extensibility to 25 nm by optimizing Fresnel diffraction. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 1999, vol. 32, issue 22, pp. 114–118. DOI: <http://doi.org/10.1088/0022-3727/32/22/102>.
- [28] Cheng Y.L., Li M.L., Lin J.H., Lai J.H., Ke C.T., Huang Y.C. Development of dynamic mask photolithography system. In: *Proceedings of the IEEE International Conference on Mechatronics (ICM'05)*, 2005, pp. 467–471. DOI: <http://doi.org/10.1109/ICMECH.2005.1529302>.
- [29] Lychev S.A., Digilov A.V., Pivovarov N.A. Bending of a circular disk: from cylinder to ultrathin membrane. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2023, vol. 29, №. 4, pp. 77–105. DOI: <https://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-77-105>. EDN: <https://www.elibrary.ru/blerei>. (In Russ.)
- [30] Timoshenko S.P., Woinowsky-Krieger S. Theory of plates and shells. Moscow: Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoi literatury, 1963, 635 p. Available at: [https://dl.booksee.org/genesis/794000/f679d6f7228f673194bd1e69961a5405/_as/\[S._P._TIMOSHENKO_i_S._VOINOVSKY-KRIGER\]_Voinovsky\(BookSee.org\).pdf](https://dl.booksee.org/genesis/794000/f679d6f7228f673194bd1e69961a5405/_as/[S._P._TIMOSHENKO_i_S._VOINOVSKY-KRIGER]_Voinovsky(BookSee.org).pdf). (in Russian)
- [31] Anuriev V.I. Handbook of mechanical engineering designer in 3 vols. Vol. 1. 8th edition, revised and enlarged. Zhestkova I.N. (Ed.). Moscow: Mashinostroenie, 2001, 34 p. Available at: <https://www.servotechnica.spb.ru/library/BOOKS/Anurev?ysclid=ismzst00yj406639767>. (In Russ.)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
MATHEMATICAL MODELLING



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81

УДК 537.311.322; 621.383; 538.915; 681.586

Дата: поступления статьи: 13.12.2023
после рецензирования: 19.01.2024
принятия статьи: 28.02.2024

М.В. Долгополов

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: mikhaildolgopopolov68@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8725-7831>

М.В. Елисов

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: maksimelisov2003@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-3097-2703>

С.А. Раджапов

Физико-технический институт НПО "ФИЗИКА-СОЛНЦЕ" АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан
E-mail: rsafti@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4615-027X>

И.Р. Рахманкулов

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: 79297014450@ya.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9873-0093>

А.С. Чипура

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: al_five@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-0425-0653>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР
ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ЭНЕРГИИ И ДАТЧИКОВ

АННОТАЦИЯ

Представлен комплекс программ моделирования построения последовательности энергетических зон гетеропереходов для анализа распределения носителей зарядов в гетероструктуре и внутренних характеристик, описания процессов переноса и аккумуляции заряда. Использовались аналитическая система Wolfram Mathematica и язык программирования Delphi. Основными элементами материалов задаются полупроводники, металлы контактных структур и области инжекции неравновесных носителей. Программы позволяют определять конструктивные характеристики материалов, активных зон и областей пространственного заряда, вычислять квазиуровни Ферми и встроенные потенциалы, а также эффективность гетероструктур в целом и для разделения–сбора заряда, эмиссии высокоэнергетичных бета-электронов и генерации неравновесных носителей заряда в активной области пространственного заряда, накопления заряда, определения типов барьерных гетеропереходов и типа металлизации контактности барьерного или омического, в том числе для устройств в интегральном исполнении. Программа и результаты могут быть использованы для определения свойств полупроводниковых гетероструктур в разработках преобразователей энергии и датчиков в фото- и бетавольтаике

Ключевые слова: комплекс программ, математическое моделирование, гетеропереходы, гетероструктуры, полупроводники, инжекция, энергопреобразователи, датчики, активированные наноразмерные гетеропереходы, *p-n*-переходы, электронная зонная структура.

Цитирование. Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Рахманкулов И.Р., Чипура А.С. Моделирование полупроводниковых гетероструктур для преобразователей энергии и датчиков // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 64–81. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Рахманкулов И.Р., Чипура А.С., 2024

Михаил Вячеславович Долгополов — доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра высшей математики, Самарский государственный технический университет, Российская Федерация, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

Максим Вячеславович Елисов — студент, кафедра общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Сали Аширович Раджапов — доктор физико-математических наук, Физико-технический институт НПО "ФИЗИКА-СОЛНЦЕ" АН РУз, 100084, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, 2Б.

Ирек Рафаильевич Рахманкулов — сотрудник, совместная лаборатория математической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Чипура Александр Сергеевич — исследователь и преподаватель кафедры высшей математики, Самарский государственный технический университет, 443100, Российская Федерация, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

Введение

Композитные фотобетаэлектрические гетеропереходные элементы, изготовленные из различных полупроводников n - и p -типа легирования и проводимости с технологически совместимыми механическими свойствами напряжения и периодами атомной решетки, сегодня представляют повышенный интерес с точки зрения фото- и бетавольтаики [1–4]. Когда полупроводниковая ячейка энергопреобразователя или датчика-сканера освещена, или облучена, в каждой точке генерации создается одинаковая плотность неравновесных носителей n и p , но это приводит к значительно большему увеличению относительной концентрации для второстепенных носителей, чем для основных носителей. Чтобы создать эффективный фотобетаэлектрический гетеропереход, необходимо исследовать электронные свойства используемых полупроводников с легирующими примесями и их оптимальное взаимное распределение в области гетероперехода [5; 6]. Приводится обзор известных программ анализа и оптимизации гетероструктур для неравновесных процессов с инъекцией внешнего и внутреннего облучения для прикладного использования в датчиках и преобразователях. В статье представлено использование квазиуровней Ферми для описания эффекта генерации напряжения в разомкнутой цепи во время работы фотобетагеттера — источника инъекции. Носители заряда в зоне проводимости и в валентной зоне могут создавать фотобетаэлектрическое напряжение подобно двум независимым элементам. Для некоторых диапазонов излучения большой энергии, когда генерируются неравновесные носители-электроны, элемент с проводящими контактами создает значение напряжения разомкнутой цепи. Для других диапазонов излучения возможно, что при образовании неосновных носителей дырок ячейка валентной зоны создает значение напряжения разомкнутой цепи. В случае общей генерации неосновных электронов и дырок в обоих элементах они вносят вклад в напряжение разомкнутой цепи, что позволяет исследовать взаимовлияние факторов друг на друга и явления самоорганизации.

1. Обзор разработок высокоэффективных интегрированных гетеропереходных бетавольтаических ячеек, активируемых внутренним инжектором

Обычные или традиционные бетавольтаические элементы и ячейки с внешним источником бета-излучения не дают возможности увеличить эффективность преобразования энергии бета-распада ввиду значительных потерь на излучение, самопоглощение, эффективное последовательное сопротивление, потери в контактных структурах [2–4; 6; 7]. Потенциальной возможностью повышения производительности интегрированных бетавольтаических батарей, элементов питания и их ячеек для встраивания микросистемных источников энергии в микроустройства является способ использования активированных радионуклидами полупроводников, представляющих собой сочетание в интегральном исполнении или просто в одном материале [8–12] как источника инъекции, так и преобразователя энергии. Эффекты проявляются энергетически в виде явления «внутреннего солнца» [13] и эффекта спонтанных микроплазменных сфер или неполных сфер, пучков или цилиндров на масштабе длины диффузии как источника электронов и электрон-дырочных пар при ионизационных потерях. В то же время структура взаимосвязей компонентов на молекулярном уровне [8; 13] играет решающую роль. Здесь мы предполагаем механизм диффузии на

основе встречного движения атомов углерода и кремния [14; 15] с использованием механизма вакансии и взаимного проникновения кремниевой и углеродной решеток друг в друга.

Исследования облучения полупроводниковых материалов всегда были неотъемлемой частью процедур приемки устройств, изготовленных из полупроводниковых материалов, и проводились довольно длительное время начиная примерно с 1970–80-х годов. Однако сравнительно недавно, примерно с 2010 года, активно проводятся исследования взаимодействия излучения с веществом в области материаловедения изотопов в связи с изучением внутренних эффектов инжекторов бета-излучения низкоэнергетического спектра [16; 17] с энергией ниже порога разрушения кристаллической решетки. Уделяется внимание повышению эффективности преобразования энергии при одновременном снижении уровня легирования, особенно обедненной зоны, до определенного уровня насыщения [17]. Кроме того, при низких энергиях электронов возможно необходим учет эффектов фононов и экситонов с резонансным накоплением энергии в микрогенераторах на наногетеропереходах, а также учет (импульсного) [18] эффекта туннелирования с возможностью накопления эффекта экситон + фонон — в поляритонах. Одной из важных характеристик импульсного эффекта туннелирования является возможность выбора фронта подъема импульса таким образом, чтобы он точно соответствовал энергетическому барьеру [18] на гетеропереходе с соответствующим градиентом квазиуровней Ферми [19; 20].

Хорошо известно, что инжекция имеет важное практическое значение, при ней нарушается равновесие потоков носителей заряда через ОПЗ. Инжекция происходит, если дополнительное взаимодействие направлено против поля, существующего из-за разницы в термодинамической работе выхода полупроводников, контактирующих в интерфейсе. Известно, что проникновение избыточных носителей заряда происходит по-разному для основных и неосновных носителей заряда. При инжекции неосновных носителей их заряд нейтрализуется основными носителями; поэтому в полупроводниках с высокой электропроводностью неосновные носители перемещаются из-за амбиполярной диффузии и амбиполярного дрейфа на достаточно большую глубину, ограниченную рекомбинацией и захватом носителей в центрах примесей. Инжекция неосновных носителей осуществляется блокирующими или запирающими контактами — *p-n* переходами и барьерными гетеропереходами.

В 2015 году Чепурнов, Гурская, Долгополов и др. [21] предложили устройства для генерации электрического тока путем преобразования энергии бета-распада C-14 на основе технологии эндотаксии (HT CVD) роста тонких пленок карбида кремния в кремний. Были созданы и запатентованы ООО «Бета-Вольтаика» устройства с добавлением углерода-14 на уровне *ppm* к углероду-12 в пористые или непористые структуры [22]. Устройства основывались на пористой структуре SiC/Si [9,22]. Чепурнов, Раджапов, Долгополов и др. исследовали образцы гетероструктуры с тонкими пленками SiC из непористого SiC/Si с изотипными и анизотипными гетеропереходами и измерили бета-спектры с полупроводниковыми датчиками в диапазоне энергии от 10 эВ до 200 кэВ [23; 24]. Диффузия атомов углерода по поверхности выше, чем подвижность атомов кремния, и рост пленки SiC происходит из небольшого числа активных центров [25]. Устройство включает полупроводниковую структуру планарного или вертикального типа с *p-n* переходом, радиоизотопный материал с бета-распадом, более длительным периодом активности и достаточным периодом полураспада, электрические выводы для подключения структурных элементов к электрической цепи с возможностью управления характеристиками по току и напряжению; устройство также имеет корпус для обеспечения экологической безопасности [22]. Удельная эффективность значительно увеличилась из-за меньшей скорости самопоглощения углерода-14 и объединения источника активности и активной зоны ОПЗ с использованием гетероструктуры карбида кремния на кремниевой подложке в качестве прямого преобразователя энергии [6; 22].

Важно подчеркнуть следующее. Во время процесса эндотаксии сетка дислокаций концентрируется в фазе Si. В свою очередь, SiC растет за счет превращения фазы Si, поэтому сетка дислокаций перемещается перед фронтом роста фазы SiC, тем самым улавливая неконтролируемые примеси, легирующие добавки подложки и радионуклид [21; 23]. В то же время сверхкритические ядра фазы SiC на подложке Si еще не формируют механических напряжений из-за несовпадения параметров решетки. Технически возможно создать таким образом масштабируемые активированные наномасштабные гетеропереходы [20; 26] (АНГП, ANHJ — Activated Nanoscale Heterojunctions).

В 2018 году в университете Бристоля было предложено понятие радиоактивных алмазов. Возможность выращивания алмазов с углеродом-14 с использованием метода химического осаждения из газовой фазы (CVD) была описана в 2022 году в процессе замкнутого цикла переработки для бетавольтаики [27].

В 2019 году Хванг и др. предложили с целью сделать структуру батареи более компактной использовать углерод-14 как источник бета-излучения и электрод одновременно [28].

В 2020 году [29] Ванг и др. теоретически предложили бетавольтаическую батарею с гетеропереходом ⁶³NiO/Si, которая решает недостаток эффекта самопоглощения радиоактивного источника [10].

В 2022 году были описаны теоретические и экспериментальные исследования по производительности бетавольтаической ядерной батареи на основе GaN-PIN. Работа включала в себя исследование внутрен-

непроизводимого радиоизотопа ^{63}Ni для прямого преобразования (бетавольтаика) в батарее. Авторами были Хи и др. [30].

Исследование [20] в 2023 году предлагает новую парадигму для повышения эффективности чипов преобразователей энергии путем интеграции методологий геометрического и количественного масштабирования с активацией наномасштабных гетеропереходов (ANHJ) [26; 31]. Геометрическое масштабирование, характеризующееся уменьшением размеров отдельных гетеропереходов, используется для увеличения плотности гетеропереходов в ограниченной пространственной области. Параллельно применяются стратегии активации, включающие генерацию дополнительных электрон-дырочных пар внутри самого гетероперехода, особенно путем имплантации радиоактивной примеси. Это отклонение от традиционных (или конвенциональных conventional [10]) конструкций, где радиоактивный источник находится вне преобразователя, этим предполагается смягчить потери энергии [6; 20]. Активация относится к генерации дополнительных электрон-дырочных пар внутри гетероперехода, выходящей за пределы традиционной практики, ограниченной поверхностным размещением радиоизотопа. Этот подход позволяет увеличить эффективность преобразования бетавольтаического эффекта за счет максимального использования энергии радиоактивного источника.

В 2023 году Ли и др. предложили интегрированную бетавольтаическую батарею с алмазом ^{14}C , который используется как источник бета-излучения и материал для преобразования энергии в бетавольтаической батарее [11]. Стабильность и зонная структура бета-распадающегося алмаза исследуются с использованием теории функционала плотности (DFT). Самая стабильная конфигурация C_{62}N_2 имеет непрямо запрещенную зону 2.5603 эВ, которая меньше, чем у чистого алмаза. С течением времени бетавольтаическая батарея с алмазом ^{14}C алмаз- ^{12}C переключается между p - n переходом и p -типа диодом Шоттки, и максимальный короткозамкнутый ток выше, чем у традиционного алмаза. Использование радиоактивных полупроводников, в частности предложение о включении алмаза ^{14}C , предлагается в качестве двухцелевого полупроводникового материала, преобразователя энергии и бета-источника. Проводятся строгие расчеты из первых принципов с использованием DFT для изучения стабильности и электронных свойств в результате изменения решетки при распаде ^{14}C [11].

Предлагаемая методология включает прямую интеграцию радиоактивного изотопа в один из полупроводников, составляющих гетеропереход [26], например, в тонкую пленку широкозонного полупроводника [32]. Такое включение облегчает поглощение энергии внутри объема полупроводника, способствуя тем самым генерации электрон-дырочных пар и увеличению суммарной плотности тока. Примером такой стратегии и служит использование алмаза ^{14}C в качестве полупроводника, способного выступать как материал бета-источника, так и один из компонентов гетероперехода [11].

При распаде ^{14}C предполагается, что атомы азота заменяют атомы углерода в кристаллической решетке. Стабильность и электронные свойства в результате этого процесса замещения/активации тщательно исследуются с использованием расчетов из первых принципов.

Основная цель — внутренняя активация гетероперехода, при которой радиоактивный изотоп выполняет композиционную роль в его материалах. Этот подход внутренней активации позволяет смягчить потери энергии по сравнению с традиционными конфигурациями, зависящими от внешних радиоактивных источников.

2. Программы для моделирования сбора заряда бетавольтаического эффекта в полупроводниковых гетероструктурах

Введение в область моделирования полупроводниковых гетероструктур часто включает в себя необходимость анализа и выбора подходящего программного обеспечения. Представим краткую выборку обзора различных программных инструментов, доступных для моделирования таких структур, и проведем выборочный сравнительный анализ их возможностей и характеристик в рамках определяемых решаемыми задачами требований.

Задачи моделирования полупроводниковых гетероструктур включают рассмотрение конкретных вычислений следующих основных характеристик неравновесного состояния: плотности тока короткого замыкания (короткой цепи) и его составляющих в эмиттере, базе, коллекторе, плотности обратного тока насыщения (плотности тока утечки), напряжения холостого хода (открытой цепи), фактора заполнения, КПД преобразования или эффективности, диффузионных длин носителей заряда, встроенных потенциалов, квазиуровней Ферми.

Специфика задач определяется малой удельной мощностью инжектора и, соответственно, малой удельной мощностью выходной, порядка от микроватт до ватта, что характерно для задач бетавольтаи-

ки и источников питания для микроэлектроники, датчиков. Математически это означает рассмотрение предела слабой инжекции [19], когда концентрация генерируемых за счет инжектора неравновесных носителей много меньше концентрации легирования материала (например, электронов в случае материала n -типа проводимости), но много больше, чем соответствующих собственных неосновных носителей (в данном примере дырок для материала полупроводника n -типа).

Отметим в целом много- и разномасштабность по расстояниям и эффектам обоснования. На масштабе ячеек из нескольких атомов предсказаны новые фазы в билинейных системах интерметаллидов на основе метода выпуклых оболочек (convex hull), адаптированного для сравнения структур с различной стехиометрией путем пересчета энергии образования структур в энергию связывания, приходящуюся на атом. Данный подход распространяется на структуры с наличием точечных дефектов [33]. Проведены квантово-механические расчеты для структуры 3C-SiC в различных реализациях теории функционала плотности (программы VASP, Siesta), исследованы влияния концентраций атомов-допантов на положение уровня Ферми, а также положение глубокого уровня в зонной структуре карбида кремния в присутствии атома азота [34]. Если мы рассматриваем формирование активированных наногетеропереходов и масштабируем их свойства на большее количество и концентрацию на поверхности подложки, то адаптируем моделирование вольт-амперных и ватт-вольтовых характеристик [7] до экстракции и идентификации с экспериментальными данными.

Вводимыми управляющими параметрами являются размеры тонких пленок (эмиттера, размеры активной зоны (областей пространственного заряда в гетеропереходе), размеры подложки (базы) в случае вертикальной структуры, размеры областей геометрических тонких пленок и дорожек топологии нанесения на поверхностные структуры в случае планарных структур). Размеры тонких пленок рассматривают от нанометров до десятков микрометров, что в совокупности с зависимостями диффузионных длин неосновных носителей заряда от концентраций легирования донорной и акцепторной примеси определяют граничные условия для решения уравнений Пуассона и транспортных уравнений Больцмана.

Важным элементом является часть с моделированием прохождения излучения инжектора определенного спектра радионуклида [2–4; 6], который может находиться как снаружи, так и внутри последовательности гетеропереходов и в приконтактной области [13]. Точный расчет зависит от обработки всего спектра и параметров полупроводникового материала, например, в программах на основе методов Монте-Карло.

Одним из программных инструментов является PC1D [35]. Эта программа предоставляет множество опций, позволяя исследователям настраивать параметры структуры солнечной ячейки на основе кремния. Например, с ее помощью можно оптимизировать кремниевые подложки p -типа, легированные атомами бора, и настраивать параметры технологий, такие как концентрация легирующих атомов и их глубина проникновения в материал. Программа также позволяет моделировать переднюю диффузию фосфора как примеси n -типа с различными значениями поверхностной концентрации и глубины проникновения, а также создавать области p -типа с обратной стороны структуры, легированные алюминием, с параметрами, аналогичными фосфорной диффузии, а также с настраиваемыми поверхностными характеристиками [36]. Эта гибкость в настройке параметров позволяет исследователям создавать энергетические диаграммы солнечных ячеек, точно соответствующие специфическим условиям и требованиям их исследования.

Однако стоит отметить, что у PC1D есть некоторые ограничения. Например, программа решает уравнение диффузии в одномерном приближении, что может не учитывать размерные эффекты в более сложных трехмерных структурах. Она также не учитывает некоторые важные явления, такие как туннелирование, пьезоэлектричество, деформации материала и неоднородности внутри структуры. Ограничены возможности моделирования различных типов границ раздела материалов и дефектов. Программа не предоставляет расчет оптических и электрических свойств, которые могут быть важными для моделирования датчиков и преобразователей. Кроме того, она не обеспечивает прямую интеграцию результатов с другими программами для получения более сложных характеристик.

С использованием программного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [37] возможно провести моделирование структуры материала с применением метода молекулярной динамики [38] и исследовать воздействие колебаний температуры на определенный слой. Это позволяет более детально рассмотреть, как материал реагирует на изменения температуры. Кроме того, LAMMPS обладает гибкостью и позволяет учитывать квантовые свойства носителей заряда в полупроводниках, что может быть важно для точного моделирования электронных и оптических свойств.

Важным аспектом работы является возможность подбора межатомных потенциалов, которые учитывают химический состав и свойства полупроводников. Это позволяет получить более точные результаты при описании сложных полупроводниковых соединений. Кроме того, данный пакет позволяет моделировать кристаллические решетки и границы раздела фаз с высокой атомной детализацией, что может быть полезно для изучения дефектов, напряжений и деформаций.

Интеграция результатов с другими программами позволяет более полно исследовать транспортные и оптические свойства материалов. Также LAMMPS способен моделировать локальные нагревы и преобразование энергии при взаимодействии носителей с дефектами, что может быть важно для понимания работы солнечных и бетавольтаических элементов.

Однако следует учитывать, что LAMMPS ориентирован на классическое молекулярное моделирование, представляя атомы как классические частицы. Это может не полностью учитывать квантовые эффекты, которые могут играть роль в полупроводниковых структурах. Также при использовании необходимо подбирать подходящие межатомные потенциалы для конкретных материалов и задач, что может потребовать дополнительного анализа и настройки. Несмотря на эти ограничения, LAMMPS остается мощным инструментом для исследования полупроводниковых структур и их потенциала в области солнечной энергии.

Использование TCAD-моделирования (Technology Computer-Aided Design) [39] представляет собой эффективный метод для анализа и проектирования полупроводниковых гетероструктур, применяемых в устройствах преобразования энергии и датчиках. TCAD предоставляет возможность моделирования физических процессов в полупроводниковых структурах с учетом их взаимодействий, что является важным для оптимизации характеристик устройств. Этот подход позволяет предварительно оценивать работоспособность различных конструктивных и технологических решений на этапе проектирования, что сокращает необходимость в дорогостоящих натуральных экспериментах.

Кроме того, TCAD позволяет учитывать влияние температуры, радиации и других факторов внешней среды на параметры структур и моделировать трехмерные эффекты в гетероструктурах. С точки зрения физических аспектов TCAD-моделирования полупроводниковых гетероструктур, этот подход имеет преимущества, такие как возможность учета множества физических эффектов, включая генерацию и рекомбинацию носителей, туннелирование, дрейф-диффузию, пьезоэффект и термоэффекты.

Однако существуют и недостатки TCAD-моделирования, такие как сложность адекватного физического описания некоторых процессов, особенно в наноструктурах, что может потребовать дополнительной калибровки параметров на основе экспериментов. Также для трехмерных моделей требуется выполнение большого объема вычислений, что может потребовать значительных вычислительных ресурсов. Ограниченная точность физических моделей может потребовать дополнительной настройки и калибровки в соответствии с реальными данными. Сложность учета наноструктурных эффектов, таких как квантовые ямы и узкие полосы, также является одним из вызовов в TCAD-моделировании.

Технология компьютерного проектирования с поддержкой TCAD имеет важное значение в разработке полупроводниковых устройств. TCAD представляет собой компромисс между строгим обращением с физикой и вычислительной эффективностью, необходимой для инженерных приложений.

Известны работы по созданию бетавольтаических элементов и их электрофизических характеристик по TCAD-моделированию [40].

Полное квантовое моделирование, такое как метод неравновесных функций Грина (NEGF) [41], редко требуется [19], потому что, например, большинство биполярных транзисторов являются полуклассическими устройствами, хотя использование методов NEGF имеет перспективы для обоснования проявлений ряда квантовых эффектов. Также отметим, что учет несовершенств структур и различия параметров решетки сопрягаемых материалов гетеропереходов II типа, наиболее эффективных для разделения и транспорта носителей заряда, приводит к оценке эффектов туннелирования, которые могут иметь и определяющий характер в механизме тока [42].

Отметим что в TCAD, а также в Comsol MultiPhysics [43] имплементированы средства построения энергетических зонных полос (энергетических диаграмм) гетеропереходов.

Дополним, что в пограничном слое часто возникают линейные дефекты типа дислокации несоответствия и напряжение, обусловленные различием решеток кремния и карбида кремния, например в [44]. Возможность улучшения связана с резким гетеропереходом, например [42], с моделированием структуры энергетической полосы зонной диаграммы с использованием программы ADEPT [45].

Как пример использования аналитической системы Wolfram Mathematica и пакета прикладных программ Matlab приведем работу по теоретическому исследованию [46] бетавольтаической батареи на гетеропереходе GaN-Si с эффективностью преобразования 23 %.

Таким образом, так называемые ядерные микробатареи на основе полупроводниковых гетеропереходных ячеек являются перспективными разработками для достижения эффективного преобразования энергии частиц, испускаемых радиоактивным источником, в электрическую. Выбор полупроводников с соответствующей структурой устройства и источником излучения эффективно улучшает их выходные характеристики.

Для сравнения в исследовании 2024 года [5] Бузид со соавторами исследовали бетавольтаическую гетеропереходную ячейку $In_{0,49}Ga_{0,51}P/GaAs$, работающую на облучении прометием-147 ($Pm-147$), который испускает отрицательные бета-частицы со средней кинетической энергией 61,93 кэВ, используя

лабораторное программное обеспечение. Моделирование плотности тока-напряжения ячейки $J(V)$ и выходной электрической мощности $P(V)$ было выполнено с использованием комплексной аналитической модели. Предложенная модель учитывала омические потери, отражение падающих бета-частиц от передней поверхности, пределы области пространственного заряда и металлургические пограничные эффекты. Для оптимизации работы ячейки авторы этой работы провели несколько симуляций, варьируя концентрацию легирования и толщину основания в конструкции устройства, а также скорости поверхностной рекомбинации в передней и тыльной областях. Кроме того, предположили разные значения плотности активности Рm-147. Полученные результаты показали, что Рm-147 в сочетании с гетеропереходом $InGaP/GaAs$ является очень подходящим решением для получения электрической энергии. Для сравнения были рассмотрены в моделировании альтернативные источники бета-излучения: H-3, Ni-63, Co-60, Cs-137 и Sr-90. Расчетная плотность электрической мощности улучшенной ячейки достигает $436,66 \text{ нВт}\cdot\text{см}^{-2}$, а эффективность преобразования — $11,91 \%$ при облучении Рm-147. Эти значения могут увеличиться до $1441,29 \text{ нВт}\cdot\text{см}^{-2}$ и $12,43 \%$ при использовании Sr-90 в качестве источника излучения.

Отметим для сравнения теоретическое исследование и моделирование в работе [47] Мохаммади 2023–2024 годов бетавольтаической батареи с радионуклидом ^{14}C и полупроводниками GaAs, GaN, SiC и алмазом в структуре p - n -перехода, в котором толщина насыщенного источника бета-излучения ^{14}C и распределение энергии по положению бета-частиц излучения, излучаемых этим источником, моделируются и рассчитываются с использованием кода Монте-Карло MCNPX. Оптимизированная толщина ^{14}C была достигнута на глубине 30 мкм . Зависимости между концентрацией легирующей добавки, плотностью тока короткого замыкания были оценены напряжением разомкнутой цепи (холостого хода) и плотностью выходной мощности. При использовании алмаза в качестве полупроводника удельная выходная мощность разработанной батареи была увеличена до $9,68 \text{ мкВт}\cdot\text{см}^{-2}$ по сравнению с другими рассмотренными полупроводниками.

Таким образом, при выборе программного обеспечения для моделирования полупроводниковых гетероструктур исследователям следует учитывать как преимущества, так и ограничения каждого инструмента, чтобы подходящим образом адаптировать его к своим потребностям. При этом отметим, что удобной программы построения последовательности гетеропереходов с контактной металлизацией с контролем квазиуровней Ферми, определением электрофизических характеристик и эффективности преобразования, разделения носителей и транспорта заряда на данный момент нет. Поэтому авторами представляется собственная программа, учитывающая комплекс требований обозначенных выше, на основе языка программирования Delphi и аналитической системы Wolfram Mathematica.

3. Модель и программа моделирования гетероструктур

Таким образом покажем, как определяются программным образом задачи построения выборок наиболее подходящих топологий последовательностей гетеропереходов, которые создают наибольшую плотность потока зарядов и безбарьерный переход на металлизацию, с одной стороны, омический — с другой, и накопление заряда в виде 2D Ферми-газа электронов или дырок. Для интерфейса между вычисляемыми параметрами и структурой последовательности гетеропереходов программа, согласно выводному рисунку, комбинирует в материалы инжекторов, металлов, полупроводников в требуемой последовательности в текущем интерактивном режиме практически моментально, которые характеризуются определенными свойствами: диэлектрическая проницаемость, собственная концентрация носителей, концентрации легирования и тип легирования, данные ширины запрещенных зон, электронного сродства, работ выхода полупроводников и металлов, активности инжекторов.

Покажем выбор переменных и управляющих параметров, а также роли квазиуровней Ферми (F_n, F_p), градиент которых определяется как источник направленности транспорта неравновесных носителей заряда [48]. Запишем хорошо известное уравнение непрерывности для дырок:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \frac{\vec{J}_p}{q} + G_p - R_p. \quad (3.1)$$

Здесь G_p — темп генерации дырок, R_p — темп рекомбинации, плотность тока \vec{J}_p связана с напряженностью электрического поля, поэтому в данном случае необходимо составить уравнение для электрического поля, которое действует на заряд q , распределений с определенной объемной плотностью p . Таким образом, можно сказать, что диэлектрическая проницаемость и электрическое поле определяют суммарную объемную плотность (концентрацию) заряда в данной точке:

$$\nabla(k_s \epsilon_0 \vec{E}) = \rho(\vec{r}). \quad (3.2)$$

Суммарная плотность заряда определяется тем, что в полупроводнике могут находиться носители заряда как дырки (с плотностью или концентрацией заряда p), так и электроны (n), ионизированные доноры N_D^+ , которые заряжены положительно, а акцепторы (N_A^-) заряжены отрицательно, таким образом, получаем следующее уравнение:

$$\rho(\vec{r}) = q[p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + N_D^+(\vec{r}) - N_A^-(\vec{r})]. \quad (3.3)$$

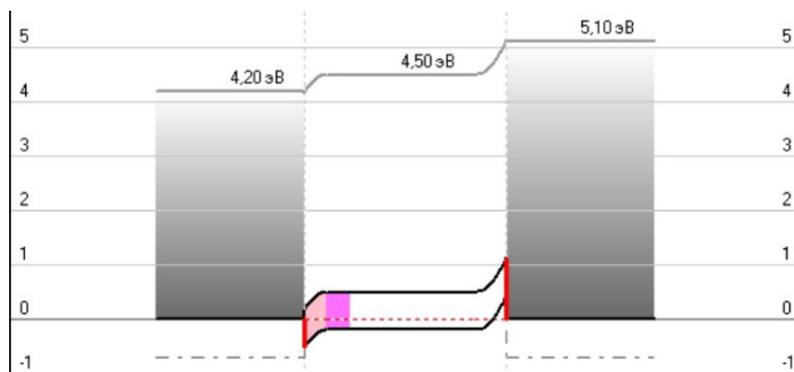


Рис. 3.1. Пример металлизированной гетероструктуры с инжекцией
 Fig. 3.1. An example of a metallized heterostructure with injection

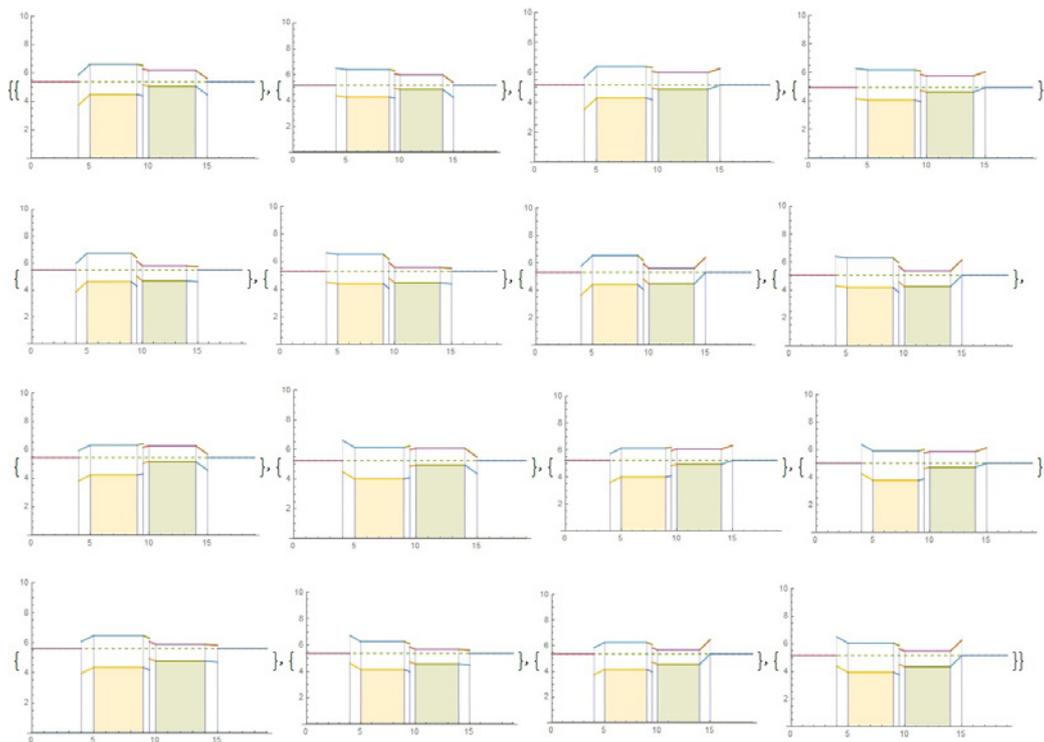


Рис. 3.2. Набор вариантов гетероперехода карбида кремния на кремнии с различными металлами
 Fig. 3.2. Set of silicon carbide on silicon heterojunction options with various metals

Уравнения для концентраций зарядов и электрического поля выглядят следующим образом:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{\vec{J}_p}{q} \right) + G_p - R_p, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{\vec{J}_n}{-q} \right) + G_n - R_n, \quad (3.5)$$

где

$$\vec{J}_p = pq\mu_p \vec{E} - qD_p \vec{\nabla} p = p\mu_p \vec{\nabla} F_p, \quad \vec{J}_n = nq\mu_n \vec{E} - qD_n \vec{\nabla} n = n\mu_n \vec{\nabla} F_n, \quad (3.6)$$

$$\rho = q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad \vec{E}(\vec{r}) = \nabla V(\vec{r}), \quad (3.7)$$

μ_n, μ_p, D_n, D_p — коэффициенты подвижности и диффузии электронов и дырок.

Следовательно, получаем уравнения для полупроводников, которые определяют общую суммарную плотность тока и плотности токов электронов и дырок. Также в программе учитывается плотность пространственного заряда в терминах плотности дырок и электронов, которые вычисляются, и концентрации легирования полупроводников примесями, которые предположительно известны и варьируются. В формулах (3.6) определяется связь напряженности электрического поля с отрицательным градиентом электростатического потенциала. Таким образом, мы можем рассматривать неизвестные переменные либо в терминах плотностей или концентраций носителей зарядов, либо в терминах квазиуровней Ферми.

Таблица

Представленные на рис. 3.2 стеки с учетом механического напряжения (под стеклом указана степень легирования в эВ как расстояние в эВ единицах от дна зоны проводимости и потолка валентной зоны), металл — карбид кремния — кремний — металл
 Table

Shown in Fig. 3.2 stacks taking into account mechanical stress (under the stack the doping degree in eV is indicated as the distance in eV units from the bottom of the conduction band and ceiling of the valence band), metal — silicon carbide — silicon — metal

Al-P-p-Al	Au-P-p-Al	Al-P-p-Au	Au-P-p-Au
1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3
Al-P-n-Al	Au-P-n-Al	Al-P-n-Au	Au-P-n-Au
1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82
Al-N-p-Al	Au-N-p-Al	Al-N-p-Au	Au-N-p-Au
0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3
Al-N-n-Al	Au-N-n-Al	Al-N-n-Au	Au-N-n-Au
0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82

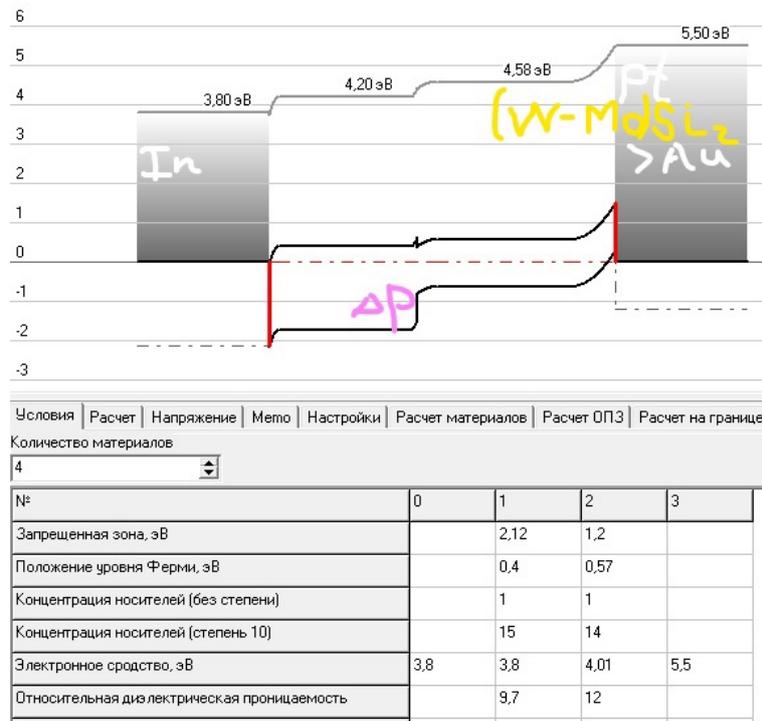


Рис. 3.3. Оптимальная структура $N - i(N - 3C - SiC/i - Si)$ с учетом механического и сдвигового напряжений с отметками подходящих металлов для контакта

Fig. 3.3. Optimal $N - i$ structure ($N - 3C - SiC/i - Si$) taking into account mechanical and shear stresses with marks of suitable metals for contact

В целом программа позволяет смоделировать композитную гетероструктуру [49] с инжектором и с металлизацией (рис. 3.1), оптимизировать ее с целью повышения эффективности преобразования энергии фото- и бета-излучения.

На рис. 3.2 приведен пример 16 диаграмм, соответствующих двум типам легирования карбида кремния и кремния в гетероструктурах (изотипных и анизотипных) и двум контактными материалами с различной работой выхода, больше и меньше, чем у кремния и карбида кремния (таблица с учетом механического напряжения). Выборка удобно позволяет определить качественно последовательность гетероперехода и металлизации с большими разделением электрон-дырочных пар и потоком заряда.

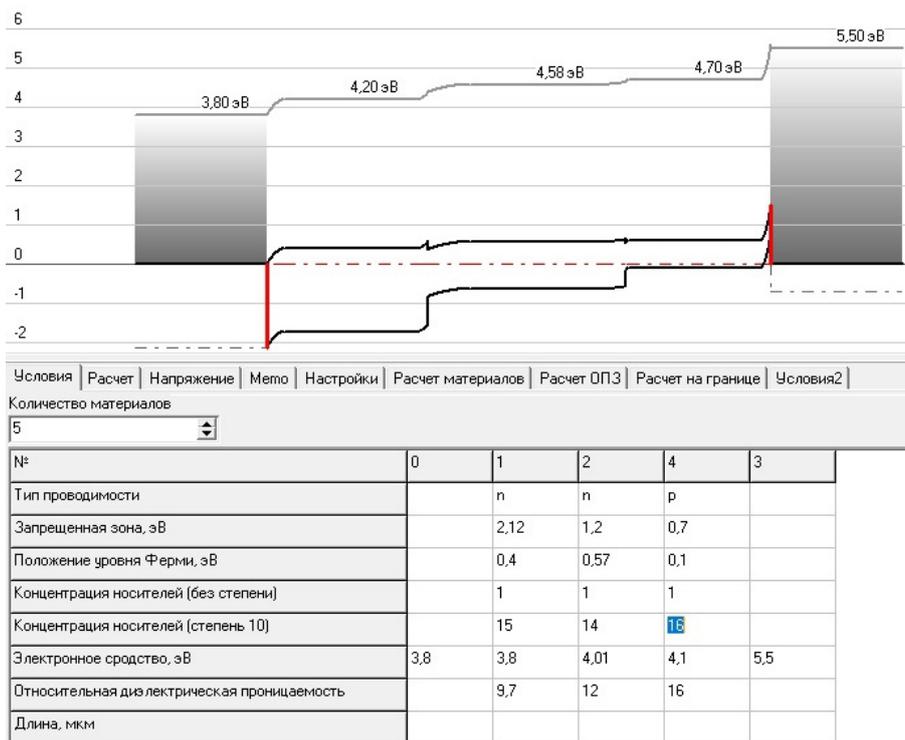


Рис. 3.4. Структура $N - i$ с учетом механического и сдвигового напряжений, справа $p - aGe$ увеличивает концентрацию и подвижность неосновных носителей в приконтактной зоне
 Fig. 3.4. $N - i$ structure taking into account mechanical and shear stresses, on the right $p - aGe$ increases concentration and mobility of minority carriers in the contact zone

В качестве металлов для контактов были смоделированы ситуации, исходя из данных работ выхода: алюминий (4.2–4.28 эВ), индий (3.60–4.09), золото (4.8–5.17), платина 5.30–5.55, свинец (4.05), бериллий (3.92), неодим (3.3), литий (2.49), кальций, цинк, подлегирование $n(p)$ альфа-германий, хром, силицид молибдена (5–6), дисилицид вольфрама (5–6) и другие. Отмечено, что наиболее эффективными являются структуры вертикальные и планарные с отличающимися от полупроводников работами выхода в большую и меньшую стороны.

На рис. 3.3–3.7 представлены выборки оптимальных структур гетеропереходов с выращенной пленкой карбида кремния на кремнии с металлизацией. Красной линией показан барьерный переход для соответствующего носителя зарядов, электронов либо дырок.

Для описания динамики квазиуровней Ферми введем один дополнительный динамический параметр — напряжение на нагрузке. От него будут зависеть формулы для квазиуровней, а также связанные с ними потенциалы. При этом значения динамического параметра возможно брать как из экспериментальных характеристик, так и теоретически расчетное. Также с ним будет связана точка максимальной мощности, к ней из программы с динамической версией структур возможно установить плотность тока или ток и определять, когда произведение тока на напряжение максимально. В статической картине обычно рисунок соответствует нулевому или какому-то постоянному значению напряжения на нагрузке. В программе заложена возможность математически определять квазиуровни Ферми при различном напряжении нагрузки, динамику и точку максимальной мощности.

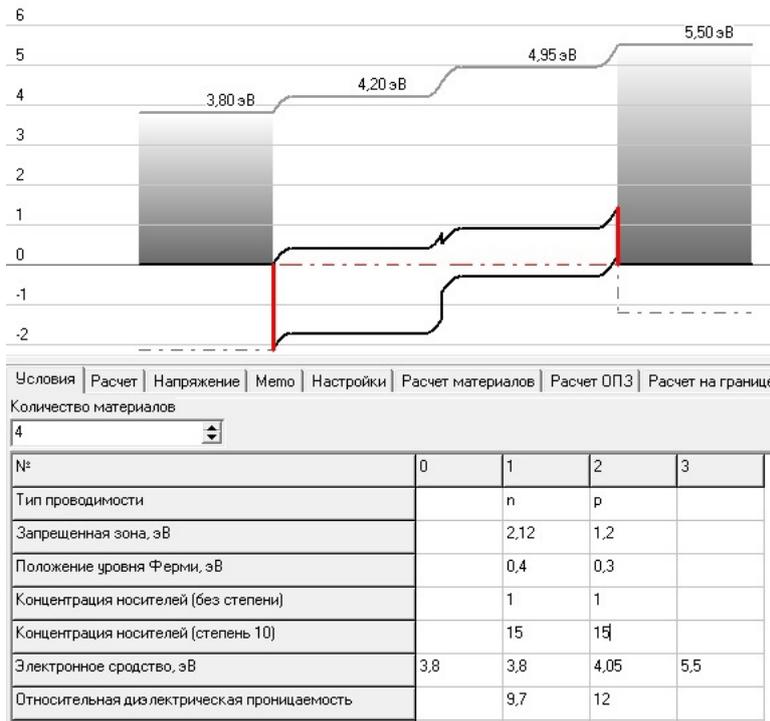


Рис. 3.5. Структура (максимально подходящая) $N-p$ с учетом механического и сдвигового напряжений (Ge не улучшает), имеется "пикоч"(или "клюв") для увеличения концентрации электронного 2D Ферми-газа

Fig. 3.5. Structure (most suitable) $N-p$ taking into account mechanical and shear stresses (Ge does not improve), there is a "spike"(or "beak") to increase the concentration of electron 2D Fermi gas

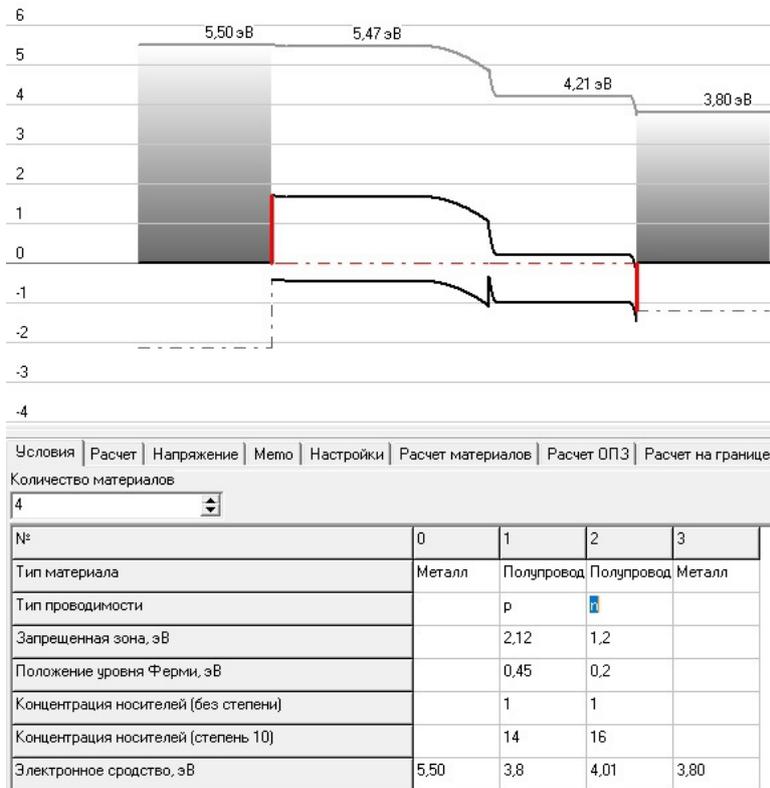


Рис. 3.6. Структура (максимально подходящая) $P-n$ с учетом механического и сдвигового напряжений
 Fig. 3.6. Structure (most suitable) $P-n$ taking into account mechanical and shear stresses

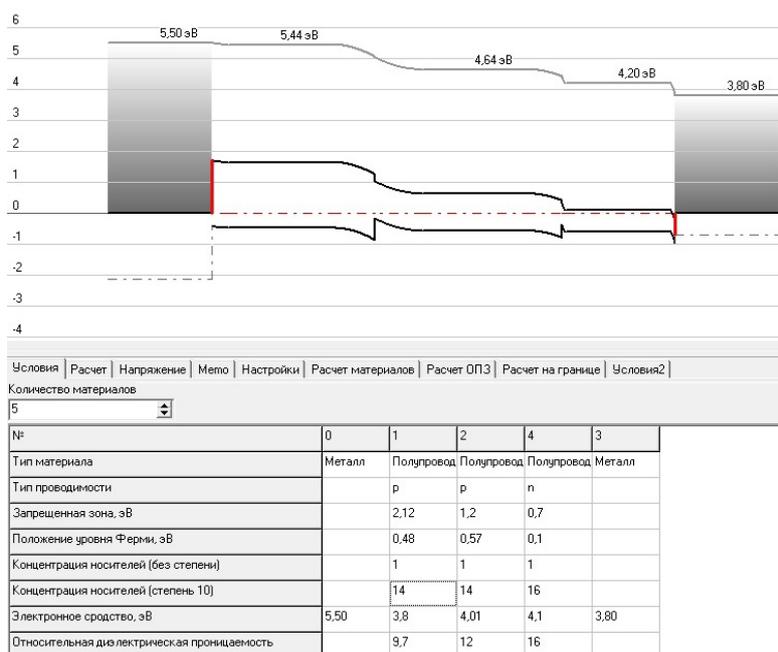


Рис. 3.7. Улучшение структуры $P-p-n-aGe$ с учетом механического и сдвигового напряжений
 Fig. 3.7. Improvement of the $P-p-n-aGe$ structure, taking into account mechanical and shear stresses

Заклучение

В данной статье рассматриваются различные методологии математического моделирования полупроводниковых гетероструктур, которые имеют широкое применение в расчетах и в практических разработках и прогнозировании энергетических преобразователей и датчиков. Исследование представляет развитую версию программы для оптимизации солнечных элементов, фотобетапреобразователей и датчиков на гетеропереходах, представляя комплексный подход к моделированию и анализу. Также осуществлен критический обзорный анализ возможностей и ограничений TCAD-моделирования для описания физических процессов в наноструктурах, учитывая сложное взаимодействие различных эффектов. Подчеркнуты перспективы улучшения TCAD через более точные физические модели и оптимизацию вычислений. Представлены примеры использования молекулярной динамики с использованием программы LAMMPS для изучения дефектов и диффузии в гетероструктурах, а также одномерной модели PC1D для моделирования тонкопленочных солнечных элементов и детекторов. Приведены примеры. Отмечена возможность интеграции результатов молекулярной динамики в TCAD-моделирование для более полного описания физических процессов.

Обосновано применение Wolfram Mathematica для аналитического решения уравнений, описывающих физику исследуемых структур, и для визуализации результатов. Например, этот инструмент используется для построения графиков с использованием функций ContourPlot, Dynamic Visualization и Manipulate для анализа КПД и плотности токов, особенно для динамических моделей неравновесных процессов для активной зоны гетероперехода с источником генерации внутри и с различными граничными условиями. В качестве примеров, иллюстрирующих программу в Delphi, используются статические модели на основе $Me - 3C - SiC/Si - Me$ с различными вариациями легирования и последовательностями гетеропереходов и контактов с металлами.

Таким образом, комплексный подход, объединяющий TCAD, PC1D, LAMMPS, Delphi и Wolfram Mathematica и моделирование Монте-Карло, предоставляет возможность всестороннего исследования физических процессов в полупроводниковых гетероструктурах на различных временных и пространственных шкалах, что имеет важное значение для улучшения характеристик энергетических преобразователей и датчиков.

Литература

[1] Алфёров Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32, № 1. С. 3–18. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/34218>.

- [2] Yakimov E.V. Prediction of Betavoltaic Battery Parameters // *Energies*. 2023. Vol. 16, Issue 9. Article number 3740. DOI: <https://doi.org/10.3390/en16093740>.
- [3] Naseem M.B., Kim H.S., Lee J., Kim C.H., In S.-I. Betavoltaic Nuclear Battery: A Review of Recent Progress and Challenges as an Alternative Energy Source // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2023. Vol. 127, Issue 16. Pp. 7565–7579. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c00684>.
- [4] Zhou Chunlin, Zhang Jinsong, Wang Xu, Yang Yushu, Xu Pan, Li Peixian, Zhang Lu, Chen Zhiyuan, Feng Huanran, Wu Weiwei. Review—Betavoltaic Cell: The Past, Present, and Future // *ECS Journal of Solid State Science and Technology*. 2021. Vol. 10, Number 2. Article number 027005. DOI: <https://doi.org/10.1149/2162-8777/abe423>.
- [5] Bouzid F., Kayahan E., Saeed M.A. et al. Modeling and simulation of an InGaP/GaAs heterojunction betavoltaic cell powered by promethium-147 // *Applied Physics A*. 2024. Vol. 130. Article number 222. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07377-y>.
- [6] Чепурнов В.И., Раджапов С.А., Долгополов М.В., Пузырная Г.В., Гурская А.В. Задачи определения эффективности для микроструктур SiC*/Si и контактообразования // *Computational nanotechnology*. 2021. Т. 8, № 3. С. 59–68. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2021-8-3-59-68>. EDN: <https://www.elibrary.ru/eybfqt>.
- [7] Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Чипура А.С. Модели масштабирования электрических свойств фото- и бета-преобразователей с наногетеропереходами // *Computational Nanotechnology*. 2023. Т. 10, № 1. С. 138–146. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-1-138-146>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wkecac>.
- [8] Сурнин О.Л., Чепурнов В.И. Карбид кремния: материал для радиоизотопного источника энергии // Патент на изобретение RU 2 733 616 C2, 05.10.2020. Заявка № 2020110496 от 11.03.2020. URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2_20201005.
- [9] Dolgopolov M., Akimchenko A., Chepurnov V., Gurskaya A., Kuznetsov O., Mashnin A., Radenko V., Radenko A., Surnin O., Zanin G. Betavoltaic device in por-SiC/Si C-nuclear energy converter // *EPJ Web of Conferences*. 2017. Vol. 158. P. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201715806004>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlzim>.
- [10] Wang Y., Zheng R., Lu J., Li X., Chen Z., Zhang X., Zhang Y., Liang L., Zeng Y., Qin L., Liu Y. Theoretical prediction of output performance of ⁶³NiO-Si heterojunction betavoltaic cell // *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 121, Issue 8. Article Number 083901. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0100186>.
- [11] Li X., Lu J., Chen Z., Liu X., Liu Y., Zhang Y., Zhang Y., Tian F. ¹⁴C diamond as energy converting material in betavoltaic battery: A first principles study // *AIP Advances*. 2023. Vol. 13, Issue 11. Article Number 115314. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0177302>.
- [12] Мордкович В.З., Филимонов И.С. Тарелкин С.А., Приходько Д.Д., Лупарев Н.В., Голованов А.В., Урванов С.А., Бланк В.Д. Бетавольтаический источник тока и способ его изготовления // Патент на изобретение RU 2807315 C1, 14.11.2023. Заявка № 2023119639 от 26.07.2023. URL: <https://patents.google.com/patent/RU2807315C1/ru>.
- [13] Гурская А.В., Долгополов М.В., Раджапов М.В., Чепурнов В.И. Контакты для SiC-преобразователей в диапазоне нано-микроватт // *Вестник Московского университета. Сер. 3: Физика. Астрономия*. 2023. Т. 78, № 1. С. 2310103. DOI: <https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2310103>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fcrbrk>.
- [14] Hong J.D., Davis R.F. Self-diffusion of carbon-14 in high-purity and n-doped α -SiC single crystals // *Journal of the American Ceramic Society*. 1980. Vol. 63, Issue 9-10. Pp. 546–552. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1980.tb10762.x>.
- [15] Hon M.H., Davis R.F. Self-diffusion of ¹⁴C in polycrystalline β -SiC // *Journal of Materials Science*. 1979. Vol. 14. Pp. 2411–2421. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00737031>.
- [16] Chandrashekar M.V., Thomas C.I., Li H., Spencer M.G., Lal A. Demonstration of a 4H SiC betavoltaic cell // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88, Issue 3. Article Number 033506. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2166699>.
- [17] Qiao D.-Y., Chen X.-J., Ren Y., Yuan W.-Z. A Micro Nuclear Battery Based on SiC Schottky Barrier Diode // *Journal of Microelectromechanical Systems*. 2011. Vol. 20, Issue 3. Pp. 685–690. DOI: <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2011.2127448>.
- [18] Рахимов Р.Х., Возможный механизм импульсного квантового туннельного эффекта фотокатализаторов на основе наноструктурированной функциональной керамики // *Computational Nanotechnology*. 2023. Т. 10, № 3. С. 26–34. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-3-26-34>. EDN: <https://elibrary.ru/QZQMCA>.
- [19] Lundstrom M. Carrier Transport in BJTs: from Ballistic to Diffusive and Off-Equilibrium // *IEEE BiCMOS and Compound Semiconductor Integrated Circuits and Technology Symposium (BCICTS)*. San Diego, CA, USA. 2018. Pp. 174–181. DOI: <https://doi.org/10.1109/BCICTS.2018.8551154>.
- [20] Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I., Chipura A.S., Elisov M.V., Radzhapov S. Scaling and activation of nanoheterojunctions on silicon and silicon carbide substrates // *Proceedings of the International Conference “Fundamental and Applied Problems of Modern Physics”*. 2023. Section II. Pp. 88–92. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=54922680>. EDN: <https://www.elibrary.ru/mfrqsi>.

- [21] Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И. ^{14}C бета-преобразователь // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48, № 6. С. 901–909. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=48163114>. EDN: <https://www.elibrary.ru/dmrnfd>.
- [22] Долгополов М.В., Сурнин О.Л., Чепурнов В.И. Устройство генерирования электрического тока посредством преобразования энергии радиохимического бета-распада C-14 // Патент на изобретение RU 2 714 690 C2, 19.02.2020. Заявка № 2019127719 от 02.09.2019. URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2_20200219.
- [23] Dolgoplov M., Chepurnov V., Gurskaya A., Akimchenko A., Puzyrnaya G., Radzhapov S. Micro alloying of SiC by radioisotope // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 222. P. 02013. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202013>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bxidmg>.
- [24] Dolgoplov M., Kuznetsov O., Chepurnov V., Gurskaya A., Radzhapov S. C-beta energy converter efficiency modeling // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 222. P. 02012. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/txrdbh>.
- [25] Galashev A.Y., Abramova K.A. Computer simulation of obtaining thin films of silicon carbide // Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. Vol. 25, Issue 5. Pp. 3834–3847. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP04208H>.
- [26] Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Чепурнов В.И., Чипура А.С. КПД активированных наногетеропереходов на подложках кремния и карбида кремния // Computational Nanotechnology. 2023. Т. 10, № 4. С. 91–102. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-4-91-102>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bbevkn>.
- [27] Verbelen Y., Boardman M., Andrade H.D., Mackenzie R., Wallace-Smith T., Kaluvan S., Hutson C., Osbourne S., Bickerton I., Fox N. et al. Closed-loop Recycling Process Flow for Diamond Betavoltaics // In: F. Kongoli, K. Aifantis, C. Capiglia, A. Fox, V. Kumar, A. Tressaud, Z. Bakenov, A. Qurashi. (Eds.), Sustainable Industrial Processing Summit SIPS2022 Volume 14 Yazami Intl. Symp Secondary Battery Manufacturing & Recycling and Electrochemistry (pp. 89-104). Montreal, Canada: FLOGEN Star Outreach. URL: <https://www.flogen.org/sips2022/paper-14-244.html>.
- [28] Hwang Y., Park Y.H., Kim H.S., Kim D.H., Ali S., Sorcar S., Flores M.C., Hoffmann M.R., In S.-I. C-14 powered dye-sensitized betavoltaic cells // Chemical Communications. 2020. Vol. 56, Issue 52. Pp. 7080–7083. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CC02046J>.
- [29] Li X., Lu J., Zheng R., Wang Y., Xu X., Liu Y., He R. Comparison of time-related electrical properties of PN junctions and Schottky diodes for ZnO-based betavoltaic batteries // Nuclear Science and Techniques. 2020. Vol. 31. Article number 18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41365-020-0723-y>.
- [30] Shanxue Xi, Linxiang Li, Chunzhi Zhou, Haijun Li, Guangwei Huang, Kun Wu, Zungang Wang, Yiyun Zhang. Researches on the performance of GaN-PIN betavoltaic nuclear battery // Radiation Effects and Defects in Solids. 2022. Vol. 177, Issue 3–4. Pp. 213–229. DOI: <https://doi.org/10.1080/10420150.2021.2024541>.
- [31] Гурская А.В., Долгополов М.В., Елисов М.В. и др. Комбинированное масштабирование наночипов-генераторов для бетавольтаики // Письма в журнал Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2023. Т. 20, № 5. С. 1230–1237.
- [32] Долгополов М.В., Чипура А.С. Моделирование бетавольтаического элемента на наногетеропереходах GaN и GaP на подложках Si и 3C-SiC/Si // Вестник Самарского университета. Естественная серия. 2023. Т. 29, № 4. С. 133–142. DOI: <https://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-133-142>. EDN: <https://www.elibrary.ru/cwlrwb>.
- [33] Chepurnov V.I., Dolgoplov M.V., Gurskaya A.V., Puzyrnaya G.V., Elkhimov D.E. Radiation-doped SiC*/Si heterostructure formation and defects evolution // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2155. Article number 012012. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2155/1/012012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tyuxar>.
- [34] Alimov L.E., Anufriev A.V., Gurskaya A.V., Chepurnov V.I., Puzyrnaya G.V., Dolgoplov M.V. Silicon Carbide 3C-SiC phase band structures calculation in DFT // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1686. Article number 012040. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1686/1/012040>. EDN: <https://www.elibrary.ru/sjiien>.
- [35] Manual PC1Dmod 6.1. PC1D. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/welcome-to-pvcdrom/pc1d> (дата обращения: 15.03.2023)
- [36] Battaglia Corsin, Cuevas Andres, De Wolf Stefaan. High-efficiency Crystalline Silicon Solar Cells: Status and Perspectives // Energy & Environmental Science. 2016. Vol. 9, Issue 5. Pp. 1552–1576. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5EE03380B>.
- [37] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <https://www.lammps.org/> (дата обращения: 15.03.2023)
- [38] Chavez J., Zhou X., Almeida S., Aguirre R., Zubia D. Molecular Dynamics Simulations of CdTe/CdS Heteroepitaxy - Effect of Substrate Orientation // Journal of Materials Science Research. 2016. Vol. 5, Issue 3. DOI: <https://doi.org/10.5539/jmsr.v5n3p1>.
- [39] Synopsys. URL: <https://www.synopsys.com/manufacturing/tcad.html> (дата обращения: 15.03.2023)

- [40] Петросянц К.О., Харитонов И.А., Пугачев А.А. Расчет ВАХ бетавольтаических микробатарей с использованием универсальной TCAD-модели // Наноиндустрия. 2020. № S96-1. С. 291–294. DOI <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2020.13.3s.291.294>. EDN: <https://www.elibrary.ru/pytdkj>.
- [41] Supriyo Datta. Nanoscale device modeling: the Green's function method // Superlattices and Microstructures. 2000. Vol. 28, Issue 4. Pp. 253–278. DOI: <https://doi.org/10.1006/spmi.2000.0920>.
- [42] Qamar A., Tanner P., Dao D.V., Phan H.P., Dinh T. Electrical Properties of p-type 3C-SiC/Si Heterojunction Diode Under Mechanical Stress // IEEE Electron Device Letters. 2014. Vol. 35, Issue 12. Pp. 1293–1295. DOI: <https://doi.org/10.1109/LED.2014.2361359>.
- [43] COMSOL — Software for Multiphysics Simulation: semiconductor-module. URL: <https://www.comsol.ru/semiconductor-module> (дата обращения: 15.03.2023)
- [44] Rahimi R., Miller C.M., Raghavan S., Stinespring C.D., Korakakis D., Electrical properties of strained nano-thin 3C-SiC/Si heterostructures // Journal of Physics D: Applied Physics. 2009. Vol. 42, Number 5. Article number 055108. DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/5/055108>.
- [45] nanoHUB. URL: www.nanohub.org. (дата обращения: 15.03.2023)
- [46] Reyyan Kavak Yuruk, Hayriye Tutunculer. Theoretical Investigation of High-Efficiency GaN-Si Heterojunction Betavoltaic Battery // Canadian Journal of Physics. 2019. Vol. 97, Number 9. Pp. 1031–1038. DOI: <https://doi.org/10.1139/cjp-2018-0579>.
- [47] Mohammadi N. Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance // Iranian Journal of Applied Physics. 2024. Vol. 13, Issue 4 - Serial Number 35, Pp. 93–111. DOI: <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44175.1334>.
- [48] Lundstrom Mark S. Fundamentals of Nanotransistors. In: Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series: Vol. 6. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2017. <https://doi.org/10.1142/9018>
- [49] Милнс А., Фойхт Д. Гетеропереходы и переходы "металл-полупроводник". Москва: Мир, 1975. 432 с.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81

Submitted: 13.12.2023

Revised: 19.01.2024

Accepted: 28.02.2024

M. V. Dolgopolov

Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

E-mail: mikhaildolgopolov68@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8725-7831>

M. V. Elisov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: maksimelisov2003@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-3097-2703>

S. A. Radzhapov

Physical-Technical Institute NGO PHYSICS-SUN, ASUz, Tashkent, Uzbekistan

E-mail: rsafti@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4615-027X>

I. R. Rakhmankulov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: 79297014450@ya.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9873-0093>

A. S. Chipura

Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

E-mail: al_five@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-0425-0653>

MODELING OF SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES FOR ENERGY CONVERTERS AND SENSORS

ABSTRACT

A set of modeling programs for constructing a sequence of energy zones of heterojunctions is presented for analyzing the distribution of charge carriers in the heterostructure and internal characteristics, for describing the processes of charge transfer and accumulation. Wolfram Mathematica analytical system and Delphi programming language were used. The main elements of materials are semiconductors, metals of contact structures and injection regions of nonequilibrium carriers. The programs allow determining the structural characteristics of materials, active zones and spatial charge regions, calculating quasi-Fermi levels and built-in potentials, as well as the efficiency of heterostructures in general and for separation-charge collection, charge accumulation, determining the type of metallization of barrier or ohmic contact.

Key words: software package; mathematical modeling; heterojunctions; heterostructures; semiconductors; injection; energy converters; sensors; activated nanoscale heterojunctions; p-n junctions; electronic band structure.

Citation. Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Rakhmankulov I.R., Chipura A.S. Modeling of semiconductor heterostructures for energy converters and sensors. *Vestnik Samarского университета. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 64–81. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Rakhmankulov I.R., Chipura A.S., 2024

Mikhail V. Dolgoplov — associate professor, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Department of Higher Mathematics, Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya Street, Samara, 443100, Russian Federation.

Maksim V. Elisov — student, Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Sali A. Radzhapov — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Physical-Technical Institute NGO PHYSICS-SUN, ASUZ, 2B, Chingiz Aitmatov Street, Tashkent, 100084, Uzbekistan.

Irek R. Rakhmankulov — Employee, Laboratory of Mathematical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Alexander S. Chipura — researcher and lecturer of the Department of Higher Mathematics, Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya Street, Samara, 443100, Russian Federation.

References

- [1] Alferov Zh.I. The History and Future of Semiconductor Heterostructures. *Semiconductors*, 1998, vol. 32, issue 1, pp. 3–18. Available at: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/34218>.
- [2] Yakimov E.B. Prediction of Betavoltaic Battery Parameters. *Energies*, 2023, vol. 16, issue 9, Article number 3740. DOI: <https://doi.org/10.3390/en16093740>.
- [3] Naseem M.B., Kim H.S., Lee J., Kim C.H., In S.-I. Betavoltaic Nuclear Battery: A Review of Recent Progress and Challenges as an Alternative Energy Source. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2023, vol. 127, issue 16, pp. 7565–7579. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c00684>.
- [4] Zhou Chunlin, Zhang Jinsong, Wang Xu, Yang Yushu, Xu Pan, Li Peixian, Zhang Lu, Chen Zhiyuan, Feng Huanran, Wu Weiwei. Review—Betavoltaic Cell: The Past, Present, and Future. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 2021, vol. 10, number 2, Article number 027005. DOI: <https://doi.org/10.1149/2162-8777/abe423>.
- [5] Bouzid F., Kayahan E., Saeed M.A. et al. Modeling and simulation of an InGaP/GaAs heterojunction betavoltaic cell powered by promethium-147. *Applied Physics A*, 2024, vol. 130, article number 222. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07377-y>.
- [6] Chepurnov V.I., Rajapov S.A., Dolgoplov M.V., Puzyrnaya G.V., Gurskaya A.V. Efficiency determination problems for SiC*/Si microstructures and contact formation. *Computational Nanotechnology*, 2021, vol. 8, no. 3, pp. 59–68. DOI: <http://doi.org/10.33693/2313-223X-2021-8-3-59-68>. EDN: <https://www.elibrary.ru/eybfqt>. (In Russ.)
- [7] Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Rajapov S.A., Chipura A.S. Scaling Models of Electrical Properties of Photo- and Beta-Converters with Nano-Heterojunctions. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 1, pp. 138–146. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-1-138-146>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wkecac>. (In Russ.)
- [8] Surnin O.L., Chepurnov V.I. Silicon carbide: materials for radioisotope energy sources. Patent Ru 2 733 616 C2, 05.10.2020. Application № 2020110496 dated 11.03.2020. Available at: https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2_20201005. (In Russ.)
- [9] Dolgoplov M., Akimchenko A., Chepurnov V., Gurskaya A., Kuznetsov O., Mashmin A., Radenko V., Radenko A., Surnin O., Zanin G. Betavoltaic device in por-SiC/Si C-nuclear energy converter. *EPJ Web of Conferences*, 2017, vol. 158, p. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201715806004>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlzim>.
- [10] Wang Y., Zheng R., Lu J., Li X., Chen Z., Zhang X., Zhang Y., Liang L., Zeng Y., Qin L., Liu Y. Theoretical prediction of output performance of ⁶³NiO-Si heterojunction betavoltaic cell. *Applied Physics Letters*, 2022, vol. 121, issue 8, Article Number 083901. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0100186>.

- [11] Li X., Lu J., Chen Z., Liu X., Liu Y., Zhang Y., Zhang Y., Tian F. ^{14}C diamond as energy converting material in betavoltaic battery: A first principles study. *AIP Advances*, 2023, vol. 13, issue 11, Article Number 115314. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0177302>.
- [12] Mordkovich V.Z., Filimonenkov I.S., Tarelkin S.A. Prikhodko D.D., Luparev N.V., Golovanov A.V., Urvanov S.A., Blank V.D. Beta-voltaic current source and method of its manufacture. Patent RU 2807315 C1, 14.11.2023. Application № 2023119639 dated 26.07.2023. Available at: <https://patents.google.com/patent/RU2807315C1/ru>. (In Russ.)
- [13] Gurskaya A.V., Dolgopolov M.V., Rajapov S.A., Chepurnov V.I. Contacts for SiC Nano-Microwatt Energy Converters. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3: Fizika. Astronomiya*, no. 1, p. 2310103. DOI: <https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2310103>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fcrbrk>.
- [14] Hong J.D., Davis R.F. Self-diffusion of carbon-14 in high-purity and n-doped α -SiC single crystals. *Journal of the American Ceramic Society*, 1980, vol. 63, issue 9-10, pp. 546–552. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1980.tb10762.x>.
- [15] Hon M.H., Davis R.F. Self-diffusion of ^{14}C in polycrystalline β -SiC. *Journal of Materials Science*, 1979, vol. 14, pp. 2411–2421. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00737031>.
- [16] Chandrashekhara M.V., Thomas C.I., Li H., Spencer M.G., Lal A. Demonstration of a 4H SiC betavoltaic cell. *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 88, issue 3, Article Number 033506. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2166699>.
- [17] Qiao D.-Y., Chen X.-J., Ren Y., Yuan W.-Z. A Micro Nuclear Battery Based on SiC Schottky Barrier Diode. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2011, vol. 20, issue 3, pp. 685–690. DOI: <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2011.2127448>.
- [18] Rakhimov R.Kh. A possible mechanism of the optical quantum tunneling effect in photocatalysts based on nanostructured functional ceramics. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 3, pp. 26–29. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-3-26-34>. EDN: <https://elibrary.ru/QZQMCA>. (In Russ.)
- [19] Lundstrom M. Carrier Transport in BJTs: from Ballistic to Diffusive and Off-Equilibrium. In: *IEEE BiCMOS and Compound Semiconductor Integrated Circuits and Technology Symposium (BCICTS)*. San Diego, CA, USA, 2018, pp. 174–181. DOI: <https://doi.org/10.1109/BCICTS.2018.8551154>.
- [20] Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I., Chipura A.S., Elisov M.V., Radzhapov S. Scaling and activation of nanoheterojunctions on silicon and silicon carbide substrates. In: *Proceedings of the International Conference “Fundamental and Applied Problems of Modern Physics”*, 2023, section II, pp. 88–92. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=54922680>. EDN: <https://www.elibrary.ru/mfrqsi>.
- [21] Gurskaya A.V., Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I. C-14 Beta Converter. *Physics of Particles and Nuclei*, 2017, vol. 48, no. 6, pp. 941–944. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106377961706020X>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlfpm>. (In English; original in Russian)
- [22] Dolgopolov M.V., Surnin O.L., Chepurnov V.I. Device for generating electric current by converting the energy of radio-chemical beta-decay of C-14. Patent Ru 2 714 690 C2, 19.02.2020. Application № 2019127719 dated 02.09.2019. Available at: https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2_20200219. (In Russ.)
- [23] Dolgopolov M., Chepurnov V., Gurskaya A., Akimchenko A., Puzyrnaya G., Radzhapov S. Micro alloying of SiC by radioisotope. *EPJ Web of Conferences*, 2019, vol. 222, p. 02013. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202013>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bxidmg>.
- [24] Dolgopolov M., Kuznetsov O., Chepurnov V., Gurskaya A., Radzhapov S. C-beta energy converter efficiency modeling. *EPJ Web of Conferences*, 2019, vol. 222, p. 02012. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/txrdbh>.
- [25] Galashev A.Y., Abramova K.A., Computer simulation of obtaining thin films of silicon carbide. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, vol. 25, issue 5, pp. 3834–3847. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP04208H>.
- [26] Dolgopolov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Chepurnov V.I., Chipura A.S. Efficiency of Activated Nano-Heterojunctions on Silicon and Silicon Carbide Substrates. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 4, pp. 91–102. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-4-91-102>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bbevkn>. (In Russ.)
- [27] Verbelen Y., Boardman M., Andrade H.D., Mackenzie R., Wallace-Smith T., Kaluvan S., Hutson C., Osbourne S., Bickerton I., Fox N. et al. Closed-loop recycling process flow for diamond betavoltaics. In: F. Kongoli, K. Aifantis, C. Capiglia, A. Fox, V. Kumar, A. Tressaud, Z. Bakenov, A. Qurashi. (Eds.). Sustainable Industrial Processing Summit SIPS2022 Volume 14 Yazami Intl. Symp Secondary Battery Manufacturing & Recycling and Electrochemistry (pp. 89–104). Montreal, Canada: FLOGEN Star Outreach. URL: <https://www.flogen.org/sips2022/paper-14-244.html>.
- [28] Hwang Y., Park Y.H., Kim H.S., Kim D.H., Ali S., Sorcar S., Flores M.C., Hoffmann M.R., In S.-I. C-14 powered dye-sensitized betavoltaic cells. *Chemical Communications*, 2020, vol. 56, issue 52, pp. 7080–7083. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CC02046J>.

- [29] Li X., Lu J., Zheng R., Wang Y., Xu X., Liu Y., He R. Comparison of time-related electrical properties of PN junctions and Schottky diodes for ZnO-based betavoltaic batteries. *Nuclear Science and Techniques*, 2020, vol. 31, Article number 18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41365-020-0723-y>.
- [30] Shanxue Xi, Linxiang Li, Chunzhi Zhou, Haijun Li, Guangwei Huang, Kun Wu, Zungang Wang, Yiyun Zhang. Researches on the performance of GaN-PIN betavoltaic nuclear battery. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2022, vol. 177, issue 3-4, pp. 213–229. DOI: <https://doi.org/10.1080/10420150.2021.2024541>.
- [31] Gurskaya A.V., Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radenko V.V., Radzhapov S.A. Combined Scaling of Nanochip Generators for Betavoltaics. *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 2023, vol. 20, no. 5, pp. 1088–1093. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477123050333>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fseakz>.
- [32] Dolgoplov M.V., Chipura A.S. Modeling of nanoheterojunction betavoltaic cell on GaN and GaP with Si and 3C-SiC/Si. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2023, vol. 29, no. 4, pp. 133–142. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-133-142>. EDN: <https://www.elibrary.ru/cwlrwb>. (In Russ.)
- [33] Chepurnov V.I., Dolgoplov M.V., Gurskaya A.V., Puzyrnaya G.V., Elkhimov D.E. Radiation-doped SiC*/Si heterostructure formation and defects evolution. *Journal of Physics: Conference Series*, 2022, vol. 2155, Article number 012012. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2155/1/012012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tyuxar>.
- [34] Alimov L.E., Anufriev A.V., Gurskaya A.V., Chepurnov V.I., Puzyrnaya G.V., Dolgoplov M.V. Silicon Carbide 3C-SiC phase band structures calculation in DFT. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1686, Article number 012040. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1686/1/012040>. EDN: <https://www.elibrary.ru/sjien>.
- [35] Manual PC1Dmod 6.1. PC1D. Available at: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/welcome-to-pvcdrom/pc1d> (accessed 15.03.2023)
- [36] Battaglia Corsin, Andres Cuevas, Stefaan De Wolf. High-efficiency Crystalline Silicon Solar Cells: Status and Perspectives. *Energy & Environmental Science*, 2016, vol. 9, issue 5, pp. 1552–1576. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5EE03380B>.
- [37] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: <https://www.lammps.org/> (accessed 15.03.2023)
- [38] Chavez J., Zhou X., Almeida S., Aguirre R., Zubia D. Molecular Dynamics Simulations of CdTe/CdS Heteroepitaxy — Effect of Substrate Orientation. *Journal of Materials Science Research*, 2016, vol. 5, issue 3. DOI: <https://doi.org/10.5539/jmsr.v5n3p1>.
- [39] Synopsys. Available at: <https://www.synopsys.com/manufacturing/tcad.html> (accessed 15.03.2023)
- [40] Petrosyants K.O., Pugachev A.A., Kharitonov A.A. Calculating CVC Betavoltaic Microbatteries Using A Universal TCAD Model. *Nanoindustry*, 2020, no. S96-1, pp. 291–294. DOI: <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2020.13.3s.291.294>. EDN: <https://www.elibrary.ru/pytdkj>. (In Russ.)
- [41] Supriyo Datta. Nanoscale device modeling: the Green's function method. *Superlattices and Microstructures*, 2000, vol. 28, issue 4, pp. 253–278. DOI: <https://doi.org/10.1006/spmi.2000.0920>.
- [42] Qamar A., Tanner P., Dao D.V., Phan H.P., Dinh T. Electrical Properties of p-type 3C-SiC/Si Heterojunction Diode Under Mechanical Stress. *IEEE Electron Device Letters*, 2014, vol. 35, issue 12, pp. 1293–1295. DOI: <https://doi.org/10.1109/LED.2014.2361359>.
- [43] COMSOL: semiconductor-module. Available at: <https://www.comsol.ru/semiconductor-module> (accessed 15.03.2023)
- [44] Rahimi R., Miller C.M., Raghavan S., Stinespring C.D., Korakakis D., Electrical properties of strained nano-thin 3C-SiC/Si heterostructures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2009, vol. 42, number 5, Article number 055108. DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/5/055108>.
- [45] nanoHUB. Available at: www.nanohub.org (дата обращения: 15.03.2023)
- [46] Reyyan Kavak Yuruk, Hayriye Tutunculer, Theoretical Investigation of High-Efficiency GaN-Si Heterojunction Betavoltaic Battery. *Canadian Journal of Physics*, 2019, vol. 97, number 9, pp. 1031–1038. DOI: <https://doi.org/10.1139/cjp-2018-0579>.
- [47] Mohammadi N. Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance. *Iranian Journal of Applied Physics*, 2024, vol. 13, issue 4, Serial Number 35, pp. 93–111. DOI: <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44175.1334>.
- [48] Lundstrom Mark S. Fundamentals of Nanotransistors. In: (*Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series: Vol. 6*). Singapore: World Scientific Publishing Company, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1142/9018>.
- [49] Milnes A.G., Feucht D.L. Heterojunctions and metal-semiconductor junctions. Moscow: Mir, 1975, 432 p. (In Russ.)

ФИЗИКА

PHYSICS



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-82-95

УДК 517.9; 519.7; 530.145.83

Дата: поступления статьи: 25.12.2023
после рецензирования: 01.02.2024
принятия статьи: 28.02.2024

А.Р. Багров

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: alexander.bagrov00@mail.ru ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1098-0300>

Е.К. Башкиров

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: bashkirov.ek@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8682-4956>

ДИНАМИКА ПЕРЕПУТАННЫХ СОСТОЯНИЙ ГРИНБЕРГЕРА — ХОРНА — ЦАЙЛИНГЕРА В ТРЕХКУБИТНОЙ ТЕПЛОЙ МОДЕЛИ ТАВИСА — КАММИНГСА

АННОТАЦИЯ

В данной статье мы исследовали динамику систем двух и трех идентичных кубитов, резонансно взаимодействующих с выделенной модой общего теплового поля резонатора без потерь. Нами найдено решение квантового временного уравнения Лиувилля для различных трех- и двухкубитных перепутанных состояний кубитов. На основе указанных решений проведено вычисление критерия перепутанности кубитов – степени совпадения. Результаты численного моделирования степени совпадения показали, что увеличение среднего числа фотонов в моде приводит к уменьшению максимальной степени перепутывания. При этом показано, что двухкубитное перепутанное состояние более устойчиво по отношению к внешнему шуму, нежели трехкубитные перепутанные состояния Гринбергера — Хорна — Цайлингера (*GHZ*). При этом истинно перепутанное *GHZ*-состояние более устойчиво к шуму, чем *GHZ*-подобное перепутанное состояние.

Ключевые слова: кубиты; трехкубитные состояния Гринбергера — Хорна — Цайлингера; резонансное взаимодействие; резонатор; тепловое поле; перепутывание; степень совпадения.

Цитирование. Багров А.Р., Башкиров Е.К. Динамика перепутанных состояний Гринбергера — Хорна — Цайлингера в трехкубитной тепловой модели Тависа — Каммингса // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 82–95. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-82-95>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Багров А.Р., Башкиров Е.К., 2024

Александр Романович Багров — магистр кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Евгений Константинович Башкиров — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Введение

Перепутанные состояния в настоящее время являются основным ресурсом физики квантовых вычислений, квантовых коммуникаций и квантовой криптографии, квантовой метрологии и т. д. [1–10]. Используя различные классы перепутанных состояний, можно ускорить вычисления, обеспечить безопасность коммуникаций и преодолеть стандартные квантовые пределы при измерениях. Для многокубитных систем существуют несколько неэквивалентных классов перепутанных состояний [11–13]. В частности, для простейшего случая трехкубитной системы существуют всего два подлинно перепутанных состояния [14–19]. К последним относятся перепутанные состояния Гринбергера — Хорна — Цайлингера (GHZ -состояния) и перепутанные состояния Вернера (W -состояния). Среди всех классов перепутанных состояний GHZ -состояния являются одними из наиболее востребованных состояний для целей квантовой информатики и квантовой метрологии [20–23]. В последние годы многочастичные GHZ -состояния были реализованы для различных физических систем кубитов: ионов в ловушках [24–26], ридберговских атомов [27], фотонов [28–30], сверхпроводящих кубитов [31–33]. Указанные работы открыли новые возможности в развитии масштабируемых квантовых компьютеров, квантовой метрологии и квантовой связи. В работах [22; 23] осуществлено перепутывание до 20 кубитов с точностью (степенью совпадения) выше 0,5. Точность и технические сложности в реализации перепутанных состояний кубитов растут экспоненциально с увеличением числа кубитов. Сложности теоретического анализа динамики GHZ -состояний также существенно возрастают с увеличением числа кубитов в системе. Поэтому при теоретическом рассмотрении таких состояний особое внимание уделяется анализу трехкубитных систем (см. ссылки в [34]). Для генерации, управления, контроля и измерения состояний систем кубитов используют электромагнитные поля резонаторов. При этом резонаторы функционируют при конечных температурах от мК для систем сверхпроводящих кубитов до комнатных в случае примесных спинов. Это означает, что кубиты взаимодействуют с тепловыми полями резонаторов. Такое взаимодействие приводит к осцилляциям Раби параметров перепутывания кубитов и, соответственно, к уменьшению степени их начального перепутывания. Еще одним эффектом, приводящим к ошибкам при измерении состояний кубитов, является мгновенная смерть перепутывания [35]. Указанный эффект экспериментально наблюдался для кубитов различной физической природы [36–38]. Поэтому представляет значительный интерес изучение методов, предотвращающих эффект мгновенной смерти перепутывания кубитов, вызванной взаимодействием с тепловыми полями резонаторов. Изучение указанного эффекта для кубитов, взаимодействующих с тепловыми шумами резонаторов, особенно важно в связи с тем, что в резонаторах всех квантовых устройств обязательно присутствуют тепловые фотоны.

В нашей работе [39] мы детально исследовали динамику перепутывания в системе трех кубитов, резонансно взаимодействующих с модой теплового квантового электромагнитного поля в идеальном резонаторе, для сепарабельных, бисепарабельных и истинно перепутанных состояний W -типа. При этом было показано, что эффект мгновенной смерти перепутывания имеет место для любых интенсивностей теплового поля резонатора. Представляет большой интерес изучить динамику трехкубитной модели в резонаторе для истинно перепутанного состояния кубитов GHZ -типа.

В настоящей статье мы исследовали динамику системы, состоящей из трех идентичных кубитов, резонансно взаимодействующих с модой теплового квантового электромагнитного поля идеального резонатора посредством однофотонных переходов, для перепутанных состояний кубитов GHZ -типа. При этом в качестве количественной меры перепутывания подсистемы кубитов использовались не отрицательности пар кубитов, а степень совпадения (fidelity) состояния подсистемы кубитов в произвольный момент времени и начального GHZ -состояния.

1. Модель и решение временного уравнения Шредингера

Рассмотрим систему трех идентичных кубитов Q_1, Q_2, Q_3 , резонансно взаимодействующих с модой квантового электромагнитного поля идеального резонатора. Гамильтониан взаимодействия такой модели в дипольном приближении и приближении вращающейся волны можно представить в виде

$$\hat{H}_{int} = \sum_{k=1}^3 \hbar \gamma (\hat{\sigma}_k^+ \hat{c} + \hat{\sigma}_k^- \hat{c}^\dagger), \quad (1)$$

где $\hat{\sigma}_k^+ = |+\rangle_{kk} \langle -|$ и $\hat{\sigma}_k^- = |-\rangle_{kk} \langle +|$ — повышающий и понижающий операторы в k -м кубите, $|-\rangle_k$ — основное и $|+\rangle_k$ — возбужденное состояние k -го кубита ($k = 1, 2, 3$), \hat{c}^\dagger и \hat{c} — операторы рождения и уничтожения фотонов резонаторной моды и γ — параметр кубит-фотонного взаимодействия.

Будем полагать, что в начальный момент времени кубиты приготовлены в истинно перепутанном состоянии GHZ -типа

$$|\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3} = \cos \theta |+, +, +\rangle + \sin \theta |-, -, -\rangle \quad (2)$$

или *GHZ*-подобном состоянии вида

$$|\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3} = \cos \varphi |+, -, -\rangle + \sin \varphi |-, +, +\rangle, \quad (3)$$

где θ и φ — параметры, определяющие степень начального перепутывания кубитов. Начальные состояния кубитов вида (2) и (3) в резонаторах можно получить с помощью импульсов электромагнитного поля определенной длительностью.

В качестве начального состояния поля выберем одномодовое тепловое состояние с матрицей плотности вида

$$\rho_F(0) = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|. \quad (4)$$

Здесь весовые функции p_n в формуле (4) имеют вид

$$p_n = \frac{\bar{n}^n}{(1 + \bar{n})^{n+1}},$$

где \bar{n} — среднее число тепловых фотонов, определяемое формулой Бозе–Эйнштейна

$$\bar{n} = (\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1)^{-1},$$

здесь k_B — постоянная Больцмана и T — температура микроволнового резонатора.

Поставим перед собой задачу найти динамику рассматриваемой модели для начального состояния кубитов (2) и (3) и теплового поля резонатора (4). В качестве первого шага для решения поставленной задачи рассмотрим решение уравнения эволюции в случае фоковского начального состояния электромагнитного поля резонатора, а затем обобщим полученные результаты для теплового состояния поля резонатора (4).

В случае чистого фоковского состояния начальную волновую функцию поля резонатора выберем в виде

$$|\phi(0)\rangle_{F,n} = |n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (5)$$

Найдем вначале временную волновую функцию системы для фоковского начального состояния поля (5), а потом обобщим результаты на случай теплового поля резонатора. Введем для нашей системы число возбуждений N , равное $N = q + n$, где q — число кубитов, приготовленных в возбужденном состоянии. Для чисел возбуждения $N \geq 3$ оператор эволюции рассматриваемой системы имеет вид

$$S(n, t) = \begin{pmatrix} S_{11}(n, t) & \cdots & S_{18}(n, t) \\ \vdots & & \vdots \\ S_{81}(n, t) & \cdots & S_{88}(n, t) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} S_{11}(n, t) &= \frac{(7 + 2n + \Omega_n) \cos(\theta_1 \gamma t) + (-7 - 2n + \Omega_n) \cos(\theta_2 \gamma t)}{2\Omega_n}, \\ S_{22}(n, t) &= \frac{4\Omega_n \cos(\sqrt{2 + n} \gamma t) + (-1 - 2n + \Omega_n) \cos(\theta_1 \gamma t) + (1 + 2n + \Omega_n) \cos(\theta_2 \gamma t)}{6\Omega_n}, \\ S_{12}(n, t) &= -i \frac{(7 + 2n + \Omega_n) \theta_1 \sin(\theta_1 \gamma t) + (-7 - 2n + \Omega_n) \theta_2 \sin(\theta_2 \gamma t)}{6\sqrt{1 + n} \Omega_n}, \\ S_{15}(n, t) &= \frac{\sqrt{(1 + n)(2 + n)} (-\cos(\theta_1 \gamma t) + \cos(\theta_2 \gamma t))}{\Omega}, \\ S_{25}(n, t) &= -i \frac{\sqrt{2 + n} \Omega_n \sin(\sqrt{2 + n} \gamma t) - (2 + n) \theta_1 \sin(\theta_1 \gamma t) + (2 + n) \theta_2 \sin(\theta_2 \gamma t)}{3\sqrt{2 + n} \Omega_n}, \\ S_{58}(n, t) &= -i \frac{(1 + 2n + \Omega_n) \theta_1 \sin(\theta_1 \gamma t) + (-1 - 2n + \Omega_n) \theta_2 \sin(\theta_2 \gamma t)}{6\sqrt{3 + n} \Omega_n}, \\ S_{18}(n, t) &= -i \frac{\sqrt{2 + n} (\sin(\theta_2 \gamma t) \theta_1 - \sin(\theta_1 \gamma t) \theta_2)}{\Omega_n}, \\ S_{55}(n, t) &= S_{22}(n, t) - \frac{1}{\Omega_n} (\cos(\theta_1 \gamma t) - \cos(\theta_2 \gamma t)), \quad S_{23}(n, t) = S_{22}(n, t) - \cos(\sqrt{2 + n} \gamma t), \\ S_{88}(n, t) &= S_{11}(n, t) - \frac{3}{\Omega} (\cos(\theta_1 \gamma t) - \cos(\theta_2 \gamma t)), \quad S_{56}(n, t) = S_{55}(n, t) - \cos(\sqrt{2 + n} \gamma t), \\ S_{27}(n, t) &= S_{25}(n, t) + i \sin(\sqrt{2 + n} \gamma t), \quad S_{28}(n, t) = \sqrt{\frac{n + 3}{n + 1}} S_{15}(n, t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_{22} = S_{33} = S_{44}, S_{55} = S_{66} = S_{77}, S_{12} = S_{13} = S_{14} = S_{21} = S_{31} = S_{41}, \\
 S_{15} = S_{16} = S_{17} = S_{51} = S_{61} = S_{71}, S_{23} = S_{24} = S_{32} = S_{34} = S_{42} = S_{43}, \\
 S_{27} = S_{36} = S_{45} = S_{54} = S_{63} = S_{72}, S_{56} = S_{57} = S_{65} = S_{67} = S_{75} = S_{76}, \\
 S_{25} = S_{26} = S_{35} = S_{37} = S_{46} = S_{47} = S_{52} = S_{53} = S_{62} = S_{64} = S_{73} = S_{74}, \\
 S_{28} = S_{38} = S_{48} = S_{82} = S_{83} = S_{84}, S_{58} = S_{68} = S_{78} = S_{85} = S_{86} = S_{87}, S_{18} = S_{81},
 \end{aligned}$$

где

$$\Omega_n = \sqrt{9 + 16(n + 2)^2}, \theta_1 = \sqrt{5(n + 2) - \Omega_n}, \theta_2 = \sqrt{5(n + 2) + \Omega_n}.$$

При записи оператора эволюции в матричной форме мы использовали базисные векторы вида

$$\begin{aligned}
 |+, +, +, n\rangle, |+, +, -, n + 1\rangle, |+, -, +, n + 1\rangle, |-, +, +, n + 1\rangle, \\
 |+, -, -, n + 2\rangle, |-, +, -, n + 2\rangle, |-, -, +, n + 2\rangle, |-, -, -, n + 3\rangle.
 \end{aligned}$$

В рассматриваемом случае волновую функцию можно найти как

$$|\Psi_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t)\rangle_n = S(n, t)|\Psi(t)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3}|n\rangle. \quad (7)$$

В дальнейшем при обобщении результатов на случай теплового поля резонатора нам потребуются также волновые функции, соответствующие числам возбуждения $N = 2, 1, 0$. Для $N = 2$ базис гильбертова пространства должен быть сужен до набора

$$\begin{aligned}
 |+, +, -, 0\rangle, |+, -, +, 0\rangle, |-, +, +, 0\rangle, \\
 |+, -, -, 1\rangle, |-, +, -, 1\rangle, |-, -, +, 1\rangle, |-, -, -, 2\rangle.
 \end{aligned}$$

Соответствующая временная волновая функция есть

$$\begin{aligned}
 |\Psi_1(t)\rangle = Z_1(t)|+, +, -, 0\rangle + Z_2(t)|+, -, +, 0\rangle + Z_3(t)|-, +, +, 0\rangle + \\
 + Z_4(t)|+, -, -, 1\rangle + Z_5(t)|-, +, -, 1\rangle + Z_6(t)|-, -, +, 1\rangle + Z_7(t)|-, -, -, 2\rangle,
 \end{aligned} \quad (8)$$

где коэффициенты $Z_i(t)$ ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$) есть

$$\begin{aligned}
 Z_1(t) = \frac{1}{15} \left[3 \left(C_1 + C_2 + C_3 - \sqrt{2}C_7 \right) + 5(2C_1 - C_2 - C_3) \cos \gamma t + \left(2C_1 + 2C_2 + 2C_3 + 3\sqrt{2}C_7 \right) \cos \sqrt{10}\gamma t - \right. \\
 \left. - i \left(5(C_4 + C_5 - 2C_6) \sin \gamma t + \sqrt{10}(C_4 + C_5 + C_6) \sin \sqrt{10}\gamma t \right) \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_2(t) = \frac{1}{15} \left[3 \left(C_1 + C_2 + C_3 - \sqrt{2}C_7 \right) - 5(C_1 - 2C_2 + C_3) \cos \gamma t + (2C_1 + 2C_2 + 2C_3 + 3\sqrt{2}C_7) \cos \sqrt{10}\gamma t - \right. \\
 \left. - i \left(5(C_4 - 2C_5 + C_6) \sin \gamma t + \sqrt{10}(C_4 + C_5 + C_6) \sin \sqrt{10}\gamma t \right) \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_3(t) = \frac{1}{15} \left[3 \left(C_1 + C_2 + C_3 - \sqrt{2}C_7 \right) - 5(C_1 + C_2 - 2C_3) \cos \gamma t + (2C_1 + 2C_2 + 2C_3 + 3\sqrt{2}C_7) \cos \sqrt{10}\gamma t + \right. \\
 \left. + 5i(2C_4 - C_5 - C_6) \sin \gamma t - i\sqrt{10}(C_4 + C_5 + C_6) \sin \sqrt{10}\gamma t \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_4(t) = \frac{1}{15} \left[5(2C_4 - C_5 - C_6) \cos \gamma t + 5(C_4 + C_5 + C_6) \cos \sqrt{10}\gamma t - i \left(5(C_1 + C_2 - 2C_3) \sin \gamma t + \right. \right. \\
 \left. \left. + \sqrt{5}(\sqrt{2}C_1 + \sqrt{2}C_2 + \sqrt{2}C_3 + 3C_7) \sin \sqrt{10}\gamma t \right) \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_5(t) = \frac{1}{15} \left[-5(C_4 - 2C_5 + C_6) \cos \gamma t + 5(C_4 + C_5 + C_6) \cos \sqrt{10}\gamma t - i \left(5(C_1 - 2C_2 + C_3) \sin \gamma t + \right. \right. \\
 \left. \left. + \sqrt{5}(\sqrt{2}C_1 + \sqrt{2}C_2 + \sqrt{2}C_3 + 3C_7) \sin \sqrt{10}\gamma t \right) \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_6(t) = \frac{1}{15} \left[-5(C_4 + C_5 - 2C_6) \cos \gamma t + 5(C_4 + C_5 + C_6) \cos \sqrt{10}\gamma t + 5i(2C_1 - C_2 - C_3) \sin \gamma t - \right. \\
 \left. - i\sqrt{5}(\sqrt{2}C_1 + \sqrt{2}C_2 + \sqrt{2}C_3 + 3C_7) \sin \sqrt{10}\gamma t \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_7(t) = \frac{1}{5} \left[\sqrt{2}C_1 - \sqrt{2}C_2 - \sqrt{2}C_3 + 2C_7 + \left(\sqrt{2}C_1 + \sqrt{2}C_2 + \sqrt{2}C_3 + \right. \right. \\
 \left. \left. + 3C_7 \right) \cos \sqrt{10}\gamma t - i\sqrt{5}(C_4 + C_5 + C_6) \sin \sqrt{10}\gamma t \right].
 \end{aligned}$$

Здесь использовано обозначение $C_i = Z_i(0)$.

Для $N = 1$ выбираем базис гильбертова пространства в виде

$$|+, -, -, 0\rangle, |-, +, -, 0\rangle, |-, -, +, 0\rangle, |-, -, -, 1\rangle.$$

Соответствующая временная волновая функция есть

$$|\Psi_2(t)\rangle = Y_1(t)|+, -, -, 0\rangle + Y_2(t)|-, +, -, 0\rangle + Y_3(t)|-, -, +, 0\rangle + Y_4(t)|-, -, -, 1\rangle, \quad (9)$$

где коэффициенты $Y_i(t)$ ($i = 1, 2, 3, 4$) имеют вид

$$Y_1(t) = \frac{1}{3} \left[2F_1 - F_2 - F_3 + (F_1 + F_2 + F_3) \cos \sqrt{3}\gamma t - i\sqrt{3}F_4 \sin \sqrt{3}\gamma t \right],$$

$$Y_2(t) = \frac{1}{3} \left[-F_1 + 2F_2 - F_3 + (F_1 + F_2 + F_3) \cos \sqrt{3}\gamma t - i\sqrt{3}F_4 \sin \sqrt{3}\gamma t \right],$$

$$Y_3(t) = \frac{1}{3} \left[-F_1 - F_2 + 2F_3 + (F_1 + F_2 + F_3) \cos \sqrt{3}\gamma t - i\sqrt{3}F_4 \sin \sqrt{3}\gamma t \right],$$

$$Y_4(t) = F_4 \cos \sqrt{3}\gamma t - \frac{i(F_1 + F_2 + F_3) \sin \sqrt{3}\gamma t}{\sqrt{3}}.$$

Здесь использованы обозначения $F_i = Y_i(0)$ ($i = 1, 2, 3, 4$).

Наконец, для $N = 0$ базис гильбертова пространства составляет вектор $|-, -, -, 0\rangle$. Соответствующая временная волновая функция есть

$$|\psi_3(t)\rangle = |-, -, -, 0\rangle. \quad (10)$$

2. Расчет степени совпадения состояний кубитов

Имея явный вид для временных волновых функций системы (7)–(10), мы можем вычислить временную матрицу плотности полной системы (три кубита+мода поля) в случае теплового состояния поля

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\Psi(t)\rangle_n \langle \Psi(t)|. \quad (11)$$

Для вычисления параметра перепутывания кубитов нам потребуется редуцированная матрица плотности трех кубитов. Ее мы можем вычислить, усредняя выражение (11) по переменным поля

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) = S p_F \rho_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t). \quad (12)$$

При исследовании перепутывания кубитов в рассматриваемой модели для сепарабельных, бисепарабельных и истинно перепутанных состояний W -типа в качестве количественного критерия перепутывания мы использовали отрицательности пар кубитов. В случае GHZ -состояний такой критерий малоинформативен, поскольку при усреднении трехкубитной матрицы плотности $\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)$ по переменным одного из кубитов два оставшихся кубита оказываются неперепутанными. Поэтому в настоящей работе мы в качестве количественного критерия перепутывания кубитов используем степень совпадения (fidelity) текущего состояния кубитов в момент времени t и их начального GHZ -состояния. В случае теплового поля резонатора состояние кубитов в произвольный момент времени является смешанным. Количественная мера степени совпадения для смешанных состояний кубитов предложена в работе [40]

$$F(\rho, \rho') = \left(\text{tr} \sqrt{\rho^{\frac{1}{2}} \rho' \rho^{\frac{1}{2}}} \right)^2. \quad (13)$$

В формуле (13) ρ – начальная матрица плотности системы и ρ' – матрица плотности кубитов в момент времени $t > 0$. Выражение (13) достаточно сложное, однако, если одна из матриц, допустим ρ , описывает чистое состояние ($\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$), то формула сильно упрощается:

$$F(\rho, \rho') = \left(\text{tr} \sqrt{|\psi\rangle\langle\psi| \rho' |\psi\rangle\langle\psi|} \right)^2 = \langle \psi | \rho' | \psi \rangle = \text{tr}(\rho \rho'). \quad (14)$$

Выбранные начальные состояния кубитов (2) и (3) являются чистыми с матрицами плотности вида $|\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3} \langle \Psi(0)|$.

Рассчитаем параметр степени совпадения для начального GHZ -состояния кубитов вида (2). В трехкубитном базисе

$$|+, +, +\rangle, |+, +, -\rangle, |+, -, +\rangle, |-, +, +\rangle,$$

$$|+, -, -\rangle, |-, +, -\rangle, |-, -, +\rangle, |-, -, -\rangle$$

матрица плотности кубитов для начального состояния вида (2) есть

$$M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0) = |\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3} \langle\Psi(0)| = \begin{pmatrix} M_{11} & 0 & \cdots & 0 & M_{18} \\ 0 & \ddots & & & 0 \\ \vdots & & 0 & & \vdots \\ 0 & & & \ddots & 0 \\ M_{81} & 0 & \cdots & 0 & M_{88} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где элементы матрицы плотности задаются формулами:

$$M_{11} = \langle+, +, +|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|+, +, +\rangle = \cos^2\theta, \quad M_{88} = \langle-, -, -|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|-, -, -\rangle = \sin^2\theta, \\ M_{18} = \langle+, +, +|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|-, -, -\rangle = \cos\theta\sin\theta, \quad M_{81} = \langle-, -, -|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|+, +, +\rangle = \cos\theta\sin\theta.$$

Запишем матрицу конечного смешанного состояния $\rho' = \rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)$ в произвольный момент времени t для состояния (3):

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\Psi(t)\rangle_{>n} \langle\Psi(t)| = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{18} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{55} & \rho_{56} & \rho_{57} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{65} & \rho_{66} & \rho_{67} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{75} & \rho_{76} & \rho_{77} & 0 \\ \rho_{81} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{88} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Тогда, подставляя матрицы (15) и (16) в формулу (14), получаем для степени совпадения следующее выражение:

$$F = \cos^2\theta\rho_{11} + \cos\theta\sin\theta(\rho_{18} + \rho_{81}) + \sin^2\theta\rho_{88}, \quad (17)$$

где

$$\rho_{11} = \langle+, +, +|\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)|+, +, +\rangle = \sum_{n=3}^{\infty} p_n [\cos^2\theta|S_{11}(n, t)|^2 + \sin^2\theta|S_{18}(n-3, t)|^2] + \\ + p_2 \cos^2\theta|S_{11}(2, t)|^2 + p_1 \cos^2\theta|S_{11}(1, t)|^2 + p_0 \cos^2\theta|S_{11}(0, t)|^2, \\ \rho_{88} = \langle-, -, -|\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)|-, -, -\rangle = \sum_{n=3}^{\infty} p_n [\cos^2\theta|S_{81}(n, t)|^2 + \sin^2\theta|S_{88}(n-3, t)|^2] + \\ + p_2 (\cos^2\theta|S_{81}(2, t)|^2 + |x_7(t)|^2) + p_1 (\cos^2\theta|S_{81}(1, t)|^2 + |y_4(t)|^2) + p_0 (\cos^2\theta|S_{81}(0, t)|^2 + \sin^2\theta), \\ \rho_{18} = \langle+, +, +|\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)|-, -, -\rangle = \sum_{n=3}^{\infty} p_n [\cos\theta\sin\theta S_{11}(n, t) S_{88}^*(n-3, t)] + \\ + p_2 \cos\theta S_{11}(2, t) x_7^*(t) + p_1 \cos\theta S_{11}(1, t) y_4^*(t) + p_0 \cos\theta \sin\theta S_{11}(0, t), \quad \rho_{81} = \rho_{18}^*.$$

Трехкубитная матрица плотности в начальный момент времени для начального состояния (3) выражается формулой:

$$M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0) = |\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3} \langle\Psi(0)| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{44} & M_{45} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{54} & M_{55} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где элементы матрицы плотности задаются формулами:

$$M_{44} = \langle-, +, +|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|-, +, +\rangle = \sin^2\varphi, \quad M_{55} = \langle+, -, -|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|+, -, -\rangle = \cos^2\varphi, \\ M_{54} = \langle+, -, -|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|-, +, +\rangle = \cos\varphi\sin\varphi, \quad M_{45} = \langle-, +, +|M_{Q_1 Q_2 Q_3}(0)|+, -, -\rangle = \sin\varphi\cos\varphi.$$

Запишем матрицу конечного смешанного состояния $\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t)$ в произвольный момент времени t для начального состояния (3):

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\Psi(t)\rangle_{>n} \langle \Psi(t)| = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{25} & \rho_{26} & \rho_{27} & 0 \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} & \rho_{35} & \rho_{36} & \rho_{37} & 0 \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} & \rho_{45} & \rho_{46} & \rho_{47} & 0 \\ 0 & \rho_{52} & \rho_{53} & \rho_{54} & \rho_{55} & \rho_{56} & \rho_{57} & \rho_{58} \\ 0 & \rho_{62} & \rho_{63} & \rho_{64} & \rho_{65} & \rho_{66} & \rho_{67} & \rho_{68} \\ 0 & \rho_{72} & \rho_{73} & \rho_{74} & \rho_{75} & \rho_{76} & \rho_{77} & \rho_{78} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{85} & \rho_{86} & \rho_{87} & \rho_{88} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Теперь, подставляя матрицы (18) и (19) в формулу (14), получаем для степени совпадения:

$$F = \sin^2 \varphi \rho_{44} + \cos \varphi \sin \varphi \cdot (\rho_{45} + \rho_{54}) + \cos^2 \varphi \rho_{55}, \quad (20)$$

где элементы матрицы плотности задаются выражениями:

$$\begin{aligned} \rho_{44} &= \langle -, +, + | \rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) | -, +, + \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n [\cos^2 \varphi |S_{45}(n-2, t)|^2 + \sin^2 \varphi |S_{44}(n-1, t)|^2] + \\ &\quad + p_1 \cdot [|Z_3(t)|^2 + \sin^2 \varphi |S_{44}(0, t)|^2] + p_0 |x_3(t)|^2, \\ \rho_{55} &= \langle +, -, - | \rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) | +, -, - \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n [\cos^2 \varphi |S_{55}(n-2, t)|^2 + \sin^2 \varphi |S_{54}(n-1, t)|^2] + \\ &\quad + p_1 \cdot [|Z_4(t)|^2 + \sin^2 \varphi |S_{54}(0, t)|^2] + p_0 [|x_4(t)|^2 + |y_1(t)|^2], \\ \rho_{45} &= \langle -, +, + | \rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) | +, -, - \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n [\sin \varphi \cos \varphi S_{44}(n-1, t) S_{55}^*(n-2, t)] + \\ &\quad + p_1 \sin \varphi S_{44}(0, t) Z_4^*(t) + p_0 x_3(t) y_1^*(t), \quad \rho_{54} = \rho_{45}^*. \end{aligned}$$

Сравним поведение степени совпадения для трехкубитных *GHZ* и *GHZ*-подобных состояний с поведением аналогичной величины для двухкубитного состояния вида

$$|\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2} = \cos \phi |+, +\rangle + \sin \phi |-, -\rangle. \quad (21)$$

Двухкубитная система с начальным состоянием кубитов (21) и полем в фоковском состоянии (5) эволюционирует следующим образом:

а) для случая начального числа фотонов в моде $n = 0$:

$$|\psi_{n=0}(t)\rangle = x_1(t) |+, +, 0\rangle + x_2(t) |+, -, 1\rangle + x_3(t) |-, +, 1\rangle + x_4(t) |-, -, 2\rangle + \sin \phi |-, -, 0\rangle,$$

б) для случая начального числа фотонов в моде $n = 1$:

$$|\psi_{n=1}(t)\rangle = y_1(t) |+, +, 1\rangle + y_2(t) |+, -, 2\rangle + y_3(t) |-, +, 2\rangle + y_4(t) |-, -, 3\rangle + Z_1(t) |+, -, 0\rangle + Z_2(t) |-, +, 0\rangle + Z_3(t) |-, -, 1\rangle,$$

в) для случая начального числа фотонов в моде $n \geq 2$:

$$|\psi_{n \geq 2}(t)\rangle = c_1(t) |+, +, n\rangle + c_2(t) |+, -, n+1\rangle + c_3(t) |-, +, n+1\rangle + c_4(t) |-, -, n+2\rangle + k_1(t) |+, +, n-2\rangle + k_2(t) |+, -, n-1\rangle + k_3(t) |-, +, n-1\rangle + k_4(t) |-, -, n\rangle.$$

Временные коэффициенты находятся из следующих систем дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} i\dot{Z}_1(t) = gZ_3(t) \\ i\dot{Z}_2(t) = gZ_3(t) \\ i\dot{Z}_3(t) = g(Z_1(t) + Z_2(t)) \end{cases}, \quad \begin{cases} i\dot{k}_1(t) = g\sqrt{n-1}(k_2(t) + k_3(t)) \\ i\dot{k}_2(t) = g(\sqrt{n-1}k_1(t) + \sqrt{nk_4(t)}) \\ i\dot{k}_3(t) = g(\sqrt{n-1}k_1(t) + \sqrt{nk_4(t)}) \\ i\dot{k}_4(t) = g\sqrt{n}(k_2(t) + k_3(t)) \end{cases}, \quad (22)$$

$$\begin{cases} i\dot{c}_1(t) = g\sqrt{n+1}(c_2(t) + c_3(t)) \\ i\dot{c}_2(t) = g(\sqrt{n+1}c_1(t) + \sqrt{n+2}c_4(t)) \\ i\dot{c}_3(t) = g(\sqrt{n+1}c_1(t) + \sqrt{n+2}c_4(t)) \\ i\dot{c}_4(t) = g\sqrt{n+2}(c_2(t) + c_3(t)) \end{cases}. \quad (23)$$

Решая системы дифференциальных уравнений (21) со следующими начальными условиями: $k_1(0) = k_2(0) = k_3(0) = 0, k_4(0) = \sin \phi$ и $Z_1(0) = Z_2(0) = 0, Z_3(0) = \sin \phi$, находим аналитические выражения

для временных коэффициентов $k_i(t)$, $Z_i(t)$:

$$\begin{aligned} Z_1(t) &= -\frac{i \cdot \sin(\sqrt{2}\gamma t) \cdot \sin \phi}{\sqrt{2}}, \quad Z_2(t) = -\frac{i \cdot \sin(\sqrt{2}\gamma t) \cdot \sin \phi}{\sqrt{2}}, \quad Z_3(t) = \cos(\sqrt{2}\gamma t) \cdot \sin \phi, \\ k_1(t) &= -\frac{2 \cdot \sqrt{n-1} \cdot \sqrt{n} \cdot \sin^2\left(\sqrt{n-\frac{1}{2}} \cdot \gamma t\right) \cdot \sin \phi}{2n-1}, \quad k_2(t) = -\frac{i \cdot \sqrt{n} \cdot \sin(\sqrt{4n-2} \cdot \gamma t) \cdot \sin \phi}{\sqrt{4n-2}}, \\ k_3(t) &= -\frac{i \cdot \sqrt{n} \cdot \sin(\sqrt{4n-2} \cdot \gamma t) \cdot \sin \phi}{\sqrt{4n-2}}, \quad k_4(t) = \frac{(n-1+n \cdot \cos(\sqrt{4n-2} \cdot \gamma t)) \sin \phi}{2n-1}. \end{aligned}$$

Для того чтобы найти временные коэффициенты $y_i(t)$, $x_i(t)$, нужно учесть следующее: $c_i(t) \rightarrow y_i(t)$ при числе фотонов в моде $n=1$ и $c_i(t) \rightarrow x_i(t)$ при числе фотонов в моде $n=0$.

Для системы дифференциальных уравнений (23) используем следующие начальные условия: $c_1(0) = \cos \phi$, $c_2(0) = c_3(0) = c_4(0)$. В итоге получаем следующие аналитические формулы для $c_i(t)$:

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \frac{(n+2+(n+1) \cdot \cos(\sqrt{4n+6} \cdot \gamma t)) \cos \phi}{2n+3}, \quad c_2(t) = -\frac{i \cdot \sqrt{n+1} \cdot \cos \phi \cdot \sin(\sqrt{4n+6} \cdot \gamma t)}{\sqrt{4n+6}}, \\ c_3(t) &= -\frac{i \cdot \sqrt{n+1} \cdot \cos \phi \cdot \sin(\sqrt{4n+6} \cdot \gamma t)}{\sqrt{4n+6}}, \quad c_4(t) = -\frac{2 \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+2} \cdot \cos \phi \cdot \sin^2\left(\sqrt{n+\frac{3}{2}} \cdot \gamma t\right)}{2n+3}. \end{aligned}$$

Двухкубитная матрица плотности в начальный момент времени для начального состояния (21) выражается формулой:

$$M_{Q_1 Q_2}(0) = |\Psi(0)\rangle_{Q_1 Q_2} \langle \Psi(0)| = \begin{pmatrix} M_{11} & 0 & 0 & M_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ M_{41} & 0 & 0 & M_{44} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где элементы матрицы плотности задаются формулами

$$\begin{aligned} M_{11} &= \langle +, + | M_{Q_1 Q_2}(0) | +, + \rangle = \cos^2 \phi, \quad M_{44} = \langle -, - | M_{Q_1 Q_2}(0) | -, - \rangle = \sin^2 \phi, \\ M_{14} &= \langle +, + | M_{Q_1 Q_2}(0) | -, - \rangle = \cos \phi \sin \phi, \quad M_{41} = \langle -, - | M_{Q_1 Q_2}(0) | +, + \rangle = \sin \phi \cos \phi. \end{aligned}$$

Запишем матрицу конечного смешанного состояния $\rho_{Q_1 Q_2}(t)$ в произвольный момент времени t для начального состояния (21):

$$\rho_{Q_1 Q_2}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)| = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Теперь подставим матрицы (24) и (25) в формулу (14) и получим для степени совпадения следующую формулу:

$$F = \rho_{11} \cos^2 \phi + (\rho_{14} + \rho_{41}) \cos \phi \sin \phi + \rho_{44} \sin^2 \phi, \quad (26)$$

где элементы матрицы плотности имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \langle +, + | \rho_{Q_1 Q_2}(t) | +, + \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n [|c_1(t)|^2 + |k_1(t)|^2] + p_1 |y_1(t)|^2 + p_0 |x_1(t)|^2, \\ \rho_{44} &= \langle -, - | \rho_{Q_1 Q_2}(t) | -, - \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n [|c_4(t)|^2 + |k_4(t)|^2] + p_1 [|y_4(t)|^2 + |Z_3(t)|^2] + p_0 [|x_4(t)|^2 + \sin^2 \phi], \\ \rho_{14} &= \langle +, + | \rho_{Q_1 Q_2}(t) | -, - \rangle = \sum_{n=2}^{\infty} p_n c_1(t) k_4^*(t) + p_1 y_1(t) Z_3^*(t) + p_0 x_1(t) \sin \phi, \quad \rho_{41} = \rho_{14}^*. \end{aligned}$$

3. Результаты и их обсуждение

Результаты компьютерного моделирования временной зависимости степени совпадения $F(t)$ от приведенного времени γt для начального истинно перепутанного GHZ -состояния (2) в случае $\theta = \pi/4$ и различных значений среднего числа фотонов представлены на рис. 1. Из рисунка хорошо видно, что взаимодействие кубитов с тепловым полем резонатора приводит к осцилляциям Раби параметра перепутывания кубитов. При этом увеличение среднего числа фотонов в моде приводит к уменьшению максимальной степени перепутывания. Это означает, что при увеличении интенсивности шума состояние трех

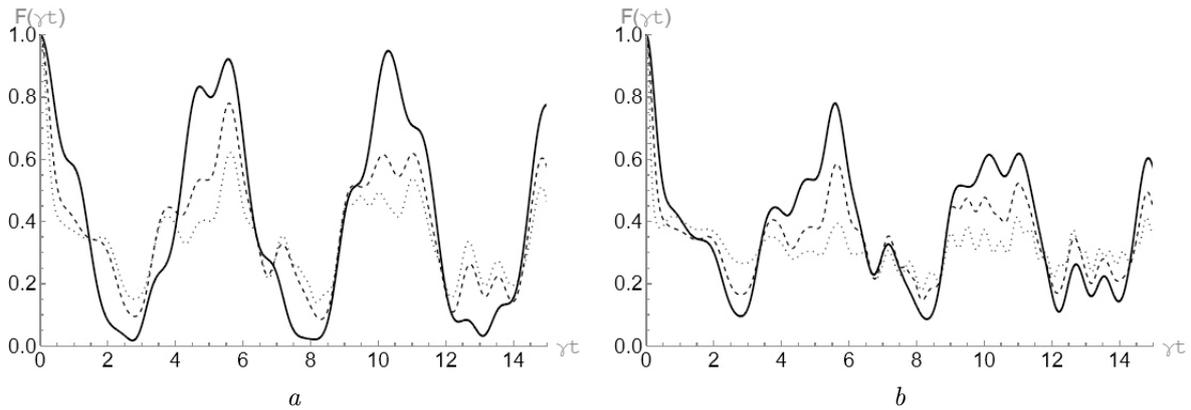


Рис. 1. График зависимости параметра степени совпадения $F(\gamma t)$ от приведенного времени γt для начального GHZ -состояния вида (2) с $\theta = \pi/4$ для различных средних чисел тепловых фотонов \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (сплошная линия), $\bar{n} = 1$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 2.5$ (точечная линия) (a); $\bar{n} = 1$ (сплошная линия), $\bar{n} = 3$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 10$ (точечная линия) (b)

Fig. 1. Graph of the dependence of the fidelity $F(\gamma t)$ on the reduced time γt for the initial GHZ state of the form (2) with $\theta = \pi/4$ for various average numbers of thermal photons \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (solid line), $\bar{n} = 1$ (dashed line), $\bar{n} = 2.5$ (dotted line) (a); $\bar{n} = 1$ (solid line), $\bar{n} = 3$ (dashed line), $\bar{n} = 10$ (dotted line) (b)

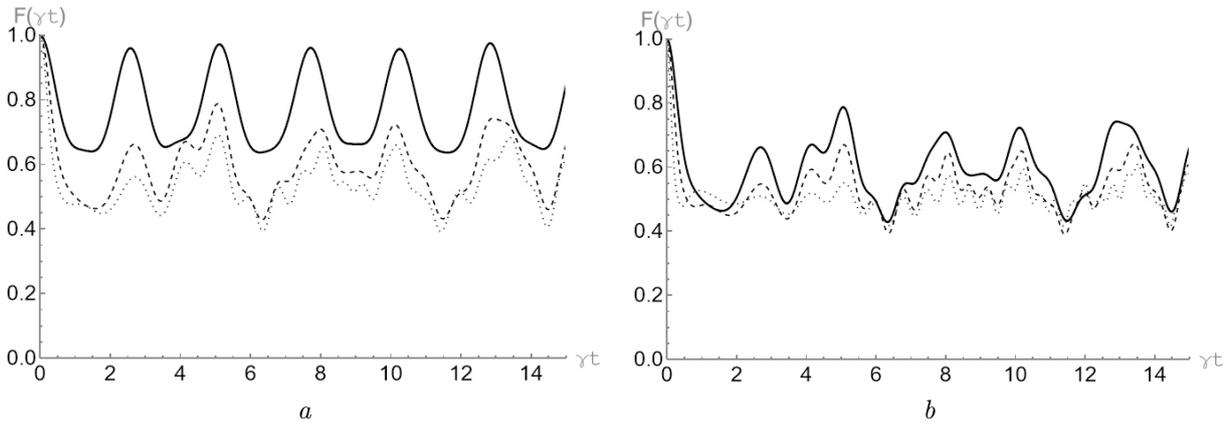


Рис. 2. График зависимости параметра степени совпадения $F(\gamma t)$ от приведенного времени γt для начального двухкубитного состояния вида (21) с $\phi = \pi/4$ для различных средних чисел тепловых фотонов \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (сплошная линия), $\bar{n} = 1$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 2.5$ (точечная линия) (a); $\bar{n} = 1$ (сплошная линия), $\bar{n} = 3$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 10$ (точечная линия) (b)

Fig. 2. Graph of the dependence of the fidelity $F(\gamma t)$ on the reduced time γt for the initial two-qubit state of the form (21) with $\phi = \pi/4$ for various average numbers of thermal photons \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (solid line), $\bar{n} = 1$ (dotted line), $\bar{n} = 2.5$ (dotted line) (a); $\bar{n} = 1$ (solid line), $\bar{n} = 3$ (dotted line), $\bar{n} = 10$ (dotted line) (b)

кубитов все менее походит на начальное перепутанное GHZ -состояние и все ближе к сепарабельному состоянию. Для сравнения на рис. 2 показаны аналогичные зависимости степени совпадения $F(t)$ для двухкубитной модели с начальным состоянием (20) в случае $\phi = \pi/4$. Сравнение графиков показывает, что в случае двухкубитной системы тепловой шум приводит к существенно меньшему разрушению начального максимально перепутанного состояния, нежели в случае трехкубитной системы. Это говорит нам о том, что истинно перепутанное GHZ -состояние менее устойчиво по отношению к внешнему шуму, чем двухкубитное состояние вида (21). Временная зависимость степени совпадения $F(t)$ от приведенного времени γt для начального GHZ -подобного перепутанного состояния (3) в случае $\varphi = \pi/4$ и различных значений среднего числа фотонов представлена на рис. 3. Из рисунка видно, что, как и для двух предыдущих состояний, взаимодействие кубитов с тепловым полем резонатора приводит к осцилляциям Раби параметра перепутывания кубитов. Однако в отличие от начального истинно перепутанного GHZ -состояния в рассматриваемом случае увеличение среднего числа тепловых фотонов в моде приводит к более существенному уменьшению максимальной степени перепутывания кубитов. Таким образом, GHZ -подобное перепутанное состояние значительно менее устойчиво по отношению к разрушающему действию теплового шума.

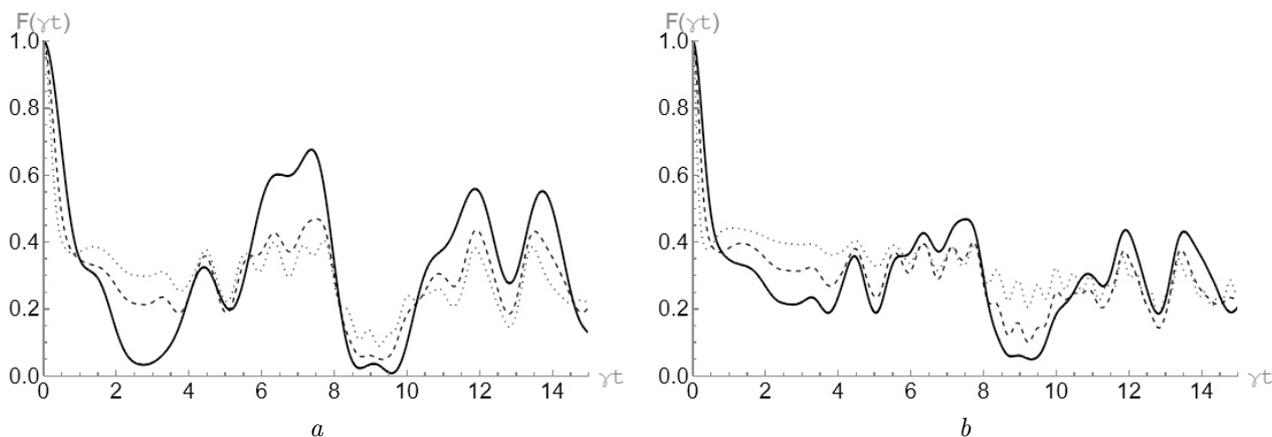


Рис. 3. График зависимости параметра степени совпадения $F(\gamma t)$ от приведенного времени γt для начального GHZ подобного состояния (3) с $\varphi = \pi/4$ для различных средних чисел тепловых фотонов \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (сплошная линия), $\bar{n} = 1$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 2.5$ (точечная линия) (a); $\bar{n} = 1$ (сплошная линия), $\bar{n} = 3$ (пунктирная линия), $\bar{n} = 10$ (точечная линия) (b)

Fig. 3. Graph of the dependence of the fidelity $F(\gamma t)$ on the reduced time γt for the initial GHZ like state (3) with $\varphi = \pi/4$ for various average numbers of thermal photons \bar{n} : $\bar{n} = 0.05$ (solid line), $\bar{n} = 1$ (dotted line), $\bar{n} = 2.5$ (dotted line) (a); $\bar{n} = 1$ (solid line), $\bar{n} = 3$ (dotted line), $\bar{n} = 10$ (dotted line) (b)

Выводы

Таким образом, в данной статье нами исследована динамика перепутывания в системе, состоящей из трех идентичных кубитов, резонансно взаимодействующих с общей модой теплового поля идеального резонатора. В работе рассмотрены два типа начальных состояний кубитов: истинно перепутанное состояние GHZ -типа (2) и GHZ -подобное перепутанное состояние (3). Нами найдено точное решение квантового уравнения Лиувилля для начальных состояний кубитов и теплового состояния поля резонатора. На основе точного решения нами рассчитана временная зависимость параметра перепутывания кубитов. В качестве критерия перепутывания кубитов выбран параметр, называемый степенью совпадения. В нашем случае данный параметр определяет степень совпадения трехкубитной матрицы плотности в произвольный момент времени t и начальной трехкубитной матрицы плотности чистых состояний (2) и (3). Для сравнения результатов нами проведен также аналогичный расчет степени совпадения в случае двухкубитной системы с начальным состоянием вида (21) и теплового поля резонатора. Результаты численного моделирования степени совпадения показали, что для всех выбранных начальных состояний кубитов их взаимодействие с тепловым полем резонатора приводит к осцилляциям Раби параметра перепутывания кубитов с уменьшением амплитуд осцилляций в процессе эволюции. При этом увеличение интенсивности поля резонатора приводит к уменьшению максимальной степени перепутывания кубитов. Показано также, что наименее устойчивым по отношению к внешнему шуму является GHZ -подобное трехкубитное состояние (3), а наиболее устойчивым — двухкубитное перепутанное состояние (21).

Литература

- [1] Gu X., Kockum A.F., Miranowicz A., Liu Y.X., Nori F. Microwave photonics with superconducting quantum circuits // *Physics Reports*. 2017. Vols. 718–719. Pp. 1–102. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.physrep.2017.10.002>.
- [2] Wendin G. Quantum information processing with super-conducting circuits: a review // *Reports on Progress in Physics*. 2017. Vol. 80. Number 10. Article Number 106001. DOI: <http://doi.org/10.1088/1361-6633/aa7e1a>.
- [3] Kjaergaard M., Schwartz M.E., Braumüller J., Krantz P., Wang J.-I., Gustavsson S., Oliver W.D. Superconducting Qubits: Current State of Play // *Annual Reviews of Condensed Matter Physics*. 2020. Vol. 11. Pp. 369–395. DOI: <http://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050605>.
- [4] Huang H.-L., Wu D., Fan D., Zhu X. Superconducting quantum computing: a review // *Science China Information Sciences*. 2020. Vol. 63. Article number 180501. DOI: <http://doi.org/10.1007/S11432-020-2881-9>.
- [5] Terhal B.M. Quantum error correction for quantum memories // *Reviews of Modern Physics*. 2015. Vol. 87, Issue 2. Pp. 307–346. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.307>.
- [6] Kimble H.J. The quantum internet // *Nature*. 2008. Vol. 453. Pp. 1023–1030. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature07127>.

- [7] Pezzé L., Smerzi A., Oberthaler M.K., Schmied R., Treutlein P. Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles // *Reviews of Modern Physics*. 2018. Vol. 90. Article number 035005. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.035005>.
- [8] Zou Y.-Q. [et al.] Beating the classical precision limit with spin-1 dicke states of more than 10,000 atoms // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2018. Vol. 115. Pp. 6381–6385. DOI: <http://doi.org/10.1073/pnas.1715105115>.
- [9] Wang X.-L. [et al.] 18-qubit entanglement with six photons' three degrees of freedom // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120, Issue 26. Article number 260502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.260502>.
- [10] Zhong H.-S. [et al.] 12-photon entanglement and scalable scattershot boson sampling with optimal entangled-photon pairs from parametric downconversion // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 121, Issue 25. Article number 250505. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.250505>.
- [11] Seevinck M., Gühne O. Separability criteria for genuine multiparticle entanglement // *New Journal of Physics*. 2010. Vol. 12. Article number 053002. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/5/053002>.
- [12] Pereira L., Zambrano L., Delgado A. Scalable estimation of pure multi-qubit states // *Npj Quantum Information*. 2022. Vol. 8. Number 57. Pp. 1–12. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41534-022-00565-9>.
- [13] Zhahir A.A., Mohd S.M., Shuhud M.I.M., Idrus B., Zainuddin H., Jan N.M., Wahiddin M. Entanglement Quantification and Classification: A Systematic Literature Review // *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*. 2022. Vol. 13, Issue 5. Pp. 218–225. DOI: <https://doi.org/10.14569/ijacsa.2022.0130527>.
- [14] Dur W., Cirac J.I. Classification of multiqubit mixed states: Separability and distillability properties // *Physical Review A: Atomic, molecular, and optical physics*. 2000. Vol. 61, Issue 4. Article number 042314. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.61.042314>.
- [15] Dur W., Cirac J.I., Vidal G. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways // *Physical Review A: Atomic, molecular, and optical physics*. 2000. Vol. 62, Issue 6. Article number 062314. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.062314>.
- [16] Acin A., Bruß D., Lewenstein M., Sanpera A. Classification of Mixed Three-Qubit States // *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 87, Issue 4. Article number 040401. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.040401>.
- [17] Garcia-Alcaine G., Sabin C. A classification of entanglement in three-qubit systems // *The European Physical Journal D*. 2008. Vol. 48. Article number 040401. Pp. 435–442. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjd/e2008-00112-5>.
- [18] Siti Munirah Mohd S.M., Idrus B., Zainuddin H., Mukhtar M. Entanglement Classification for a Three-qubit System using Special Unitary Groups // *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*. 2019. Vol. 10, Issue 7. Pp. 374–379. DOI: <https://doi.org/10.14569/IJACSA.2019.0100751>.
- [19] Akbari-Kourbolagh Y. Entanglement criteria for the three-qubit states // *International Journal of Quantum Information*. 2017. Vol. 15, No. 7. Article number 1750049. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0219749917500496>.
- [20] Gong M. [et al.] Genuine 12-qubit entanglement on a superconducting quantum processor // *Physical Review Letters*. 2019. Vol. 122, Issue 11. Article number 110501. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.110501>.
- [21] Song C. [et al.] 10-qubit entanglement and parallel logic operations with a superconducting circuit // *Physical Review Letters*. 2017. Vol. 119, Issue 18. Article number 180511. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.180511>.
- [22] Wei K.X. [et al.] Verifying multipartite entangled GHZ states via multiple quantum coherences // *Physical Review A*. 2020. Vol. 101, Issue 3. Article number 032343. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.032343>.
- [23] Song C. [et al.] Generation of multicomponent atomic Schrödinger cat states of up to 20 qubits // *Science*. 2019. Vol. 365, Issue 6453. Pp. 574–577. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.aay0600>.
- [24] Leibfried D. [et al.] Toward heisenberg-limited spectroscopy with multiparticle entangled states // *Science*. 2004. Vol. 304, Issue 5676. Pp. 1476–1478. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.10975>.
- [25] Roos C.F. [et al.] Control and measurement of three-qubit entangled states // *Science*. 2004. Vol. 304, Issue 5676. Pp. 1478–1480. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1097522>.
- [26] Monz T. [et al.] 14-qubit entanglement: creation and coherence // *Physical Review Letters*. 2011. Vol. 106, Issue 13. Article number 130506. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.130506>.
- [27] Omran A. [et al.] Generation and manipulation of Schrödinger cat states in Rydberg atom arrays // *Science*. 2019. Vol. 365, Issue 6453. Pp. 570–574. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.aax9743>.
- [28] Lu C.-Y. [et al.] Experimental entanglement of six photons in graph states // *Nature Physics*. 2007. Vol. 3. Pp. 91–95. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys507>.
- [29] Wang X.-L. [et al.] 18-qubit entanglement with six photons' three degrees of freedom // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120, Issue 26. Article number 260502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.260502>.
- [30] Zhong H.-S. [et al.] 12-photon entanglement and scalable scattershot boson sampling with optimal entangled-photon pairs from parametric downconversion // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 121, Issue 25. Article number 250505. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.250505>.

- [31] Neeley M. Generation of three-qubit entangled states using superconducting phase qubits // Nature. 2010. Vol. 467. Pp. 570–573. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature09418>.
- [32] Gong M. [et al.] Genuine 12-qubit entanglement on a superconducting quantum processor // Physical Review Letters. 2019. Vol. 122, Issue 11. Article number 110501. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.110501>.
- [33] Song C. [et al.] 10-qubit entanglement and parallel logic operations with a superconducting circuit // Physical Review Letters. 2017. Vol. 119, Issue 18. Article number 180511. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.180511>.
- [34] Li D., Cheng M., Li X., Li S. A relation among tangle, 3-tangle, and von Neumann entropy of entanglement for three qubits // Quantum Information Processing. 2023. Vol. 22. Article number 14. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11128-022-03759-4>.
- [35] Yu T., Eberly J. H. Sudden death of entanglement // Science. 2009. Vol. 323, Issue 5914. Pp. 598–601. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11128-022-03759-410.1126/science.1167343>.
- [36] Wang F. [et al.] Observation of entanglement sudden death and rebirth by controlling a solid-state spin bath // Physical Review B. 2018. Vol. 98, Issue 6, Article number 064306. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.064306>.
- [37] Sun G., Zhou Z., Mao B., Wen X., Wu P., Han S. Entanglement dynamics of a superconducting phase qubit coupled to a two-level system // Physical Review B. 2012. Vol. 86, Issue 6. Article number 064502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.064502>.
- [38] Salles A., de Melo F., Almeida M. P., Hor-Meyll M., Walborn S.P., Souto Ribeiro P. H., Davidovich L. Experimental investigation of the dynamics of entanglement: Sudden death, complementarity, and continuous monitoring of the environment // Physical Review A. 2008. Vol. 78, Issue 2. Article number 022322. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.022322>.
- [39] Bagrov A.R., Bashkirov E.K. Sudden death of entanglement in a thermal three-qubit Tavis-Cummings model // Proceedings of the 9th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology. 2023. Article number 23240901. DOI: <https://doi.org/10.1109/ITNT57377.2023.10139206>.
- [40] Jozsa R. Fidelity for Mixed Quantum States // Journal of Modern Optics. 1994. Vol. 41, Issue 12. Pp. 2315–2323. DOI: <https://doi.org/10.1080/09500349414552171>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-82-95

Submitted: 25.12.2023

Revised: 01.02.2024

Accepted: 28.02.2024

A.R. Bagrov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: alexander.bagrov00@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1098-0300>

E.K. Bashkirov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: bashkirov.ek@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8682-4956>

DYNAMICS OF ENTANGLED GREENBERGER — HORNE — ZEILINGER STATES IN THREE QUBITS TAVIS — CUMMINGS MODEL

ABSTRACT

In this paper, we investigated the dynamics of systems of two and three identical qubits interacting resonantly with a selected mode of a thermal field of a lossless resonator. We found solutions of the quantum time-dependent Liouville equation for various three- and two-qubit entangled states of qubits. Based on these solutions, we calculated the criterion of the qubit entanglement — fidelity. The results of numerical calculations of the fidelity showed that increasing the average number of photons in a mode leads to a decrease in the maximum degree of entanglement. It is shown that the two-qubit entangled state is more stable with respect to external noise than the three-qubit entangled Greenberger — Horne — Zeilinger states (*GHZ*). Moreover, a genuine entangled *GHZ*-state is more stable to noise than a *GHZ*-like entangled state.

Key words: qubits; three qubits Greenberger — Horne — Zeilinger states; resonance interaction; cavity; thermal field; entanglement; fidelity.

Citation. Bagrov A.R., Bashkirov E.K. Dynamics of entangled Greenberger — Horne — Zeilinger states in three qubits thermal Tavis — Cummings model. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya*

seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 82–95. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-82-95>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Bagrov A.R., Bashkirov E.K., 2024

Alexander R. Bagrov — Master’s Degree Student of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Eugene K. Bashkirov — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

References

- [1] X. Gu X., Kockum A.F., Miranowicz A., Liu Y.X., Nori F. Microwave photonics with superconducting quantum circuits. *Physics Reports*, 2017, vol. 718–719, pp. 1–102. DOI: <http://doi.org/10.1016/j.physrep.2017.10.002>.
- [2] Wendin G. Quantum information processing with super-conducting circuits: a review. *Reports on Progress in Physics*, 2017, vol. 80, number 10, article number 106001. DOI: <http://doi.org/10.1088/1361-6633/aa7e1a>.
- [3] Kjaergaard M., Schwartz M.E., Braumüller J., Krantz P., Wang J.-I., Gustavsson S., Oliver W.D. Superconducting Qubits: Current State of Play. *Annual Reviews of Condensed Matter Physics*, 2020, vol. 11, pp. 369–395. DOI: <http://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050605>.
- [4] Huang H.-L., Wu D., Fan D., Zhu X. Superconducting quantum computing: a review. *Science China Information Sciences*, 2020, vol. 63, article number 180501. DOI: <http://doi.org/10.1007/S11432-020-2881-9>.
- [5] Terhal B.M. Quantum error correction for quantum memories. *Reviews of Modern Physics*, 2015, vol. 87, issue 2, pp. 307–346. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.307>.
- [6] Kimble H.J. The quantum internet. *Nature*, 2008, vol. 453, pp. 1023–1030. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature07127>.
- [7] Pezzé L., Smerzi A., Oberthaler M.K., Schmied R., Treutlein P. Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles. *Reviews of Modern Physics*, 2018, vol. 90, article number 035005. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.035005>.
- [8] Zou Y.-Q. [et al.] Beating the classical precision limit with spin-1 dicke states of more than 10,000 atoms. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2018, vol. 115, pp. 6381–6385. DOI: <http://doi.org/10.1073/pnas.1715105115>.
- [9] Wang X.-L. [et al.] 18-qubit entanglement with six photons’ three degrees of freedom. *Physical Review Letters*, 2018, vol. 120, issue 26, article number 260502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.260502>.
- [10] Zhong H.-S. [et al.] 12-photon entanglement and scalable scattershot boson sampling with optimal entangled-photon pairs from parametric downconversion. *Physical Review Letters*, 2018, vol. 121, issue 25, number 250505. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.250505>.
- [11] Seevinck M., Gühne O. Separability criteria for genuine multiparticle entanglement. *New Journal of Physics*, 2010, vol. 12, article number 053002. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/5/053002>.
- [12] Pereira L., Zambrano L., Delgado A. Scalable estimation of pure multi-qubit states. *Npj Quantum Information*, 2022, vol. 8, number 57. pp. 1–12. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41534-022-00565-9>.
- [13] Zhahir A.A., Mohd S.M., Shuhud M.I.M., Idrus B., Zainuddin H., Jan N.M., Wahiddin M. Entanglement Quantification and Classification: A Systematic Literature Review. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*, 2022, vol. 13, issue 5, pp. 218–225. DOI: <https://doi.org/10.14569/ijacsa.2022.0130527>.
- [14] Dur W., Cirac J.I. Classification of multiqubit mixed states: Separability and distillability properties. *Physical Review A: Atomic, molecular, and optical physics*, 2000, vol. 61, issue 4, article number 042314. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.61.042314>.
- [15] Dur W., Cirac J.I., Vidal G. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Physical Review A: Atomic, molecular, and optical physics*, 2000, vol. 62, issue 6, Article number 062314. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.062314>.
- [16] Acin A., Bruß D., Lewenstein M., Sanpera A. Classification of Mixed Three-Qubit States. *Physical Review Letters*, 2000, vol. 87, issue 4, Article number 040401. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.040401>.
- [17] Garcia-Alcaine G., Sabin C. A classification of entanglement in three-qubit systems. *The European Physical Journal D*, 2008, vol. 48, Article number 040401, pp. 435–442. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjd/e2008-00112-5>.
- [18] Siti Munirah Mohd S.M., Idrus B., Zainuddin H., Mukhtar M. Entanglement Classification for a Three-qubit System using Special Unitary Groups. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*, 2019, vol. 10, issue 7, pp. 374–379. DOI: <https://doi.org/10.14569/IJACSA.2019.0100751>.

- [19] Akbari-Kourbolagh Y. Entanglement criteria for the three-qubit states. *International Journal of Quantum Information*, 2017, vol. 15, no. 7, article number 1750049. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0219749917500496>.
- [20] Gong M. [et al.] Genuine 12-qubit entanglement on a superconducting quantum processor. *Physical Review Letters*, 2019, vol. 122, article number 110501. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.110501>.
- [21] Song C. [et al.] 10-qubit entanglement and parallel logic operations with a superconducting circuit. *Physical Review Letters*, 2017, vol. 119, issue 18, Article number 180511. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.180511>.
- [22] Wei K.X. [et al.] Verifying multipartite entangled GHZ states via multiple quantum coherences. *Physical Review A*, 2020. vol. 101, issue 3, article number 032343. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.032343>.
- [23] Song C. [et al.] Generation of multicomponent atomic Schrödinger cat states of up to 20 qubits. *Science*, 2019, vol. 365, no. 6453, pp. 574–577. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.aay0600>.
- [24] Leibfried D. [et al.] Toward heisenberg-limited spectroscopy with multiparticle entangled states. *Science*, 2004, vol. 304, issue 5676, pp. 1476–1478. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.10975>.
- [25] Roos C.F. [et al.] Control and measurement of three-qubit entangled states. *Science*, 2004, vol. 304, issue 5676, pp. 1478–1480. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1097522>.
- [26] Monz T. [et al.] 14-qubit entanglement: creation and coherence. *Physical Review Letters*, 2011, vol. 106, issue 13, Article number 130506. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.130506>.
- [27] Omran A. [et al.] Generation and manipulation of Schrödinger cat states in Rydberg atom arrays. *Science*, 2019, vol. 365, issue 6453, pp. 570–574. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.aax9743>.
- [28] Lu C.-Y. [et al.] Experimental entanglement of six photons in graph states. *Nature Physics*, 2007, vol. 3, pp. 91–95. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys507>.
- [29] Wang X.-L. [et al.] 18-qubit entanglement with six photons' three degrees of freedom. *Physical Review Letters*, 2018, vol. 120, issue 26, Article number 260502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.260502>.
- [30] Zhong H.-S. [et al.] 12-photon entanglement and scalable scattershot boson sampling with optimal entangled-photon pairs from parametric downconversion. *Physical Review Letters*, 2018, vol. 121, issue 25, Article number 250505. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.250505>.
- [31] Neeley M. Generation of three-qubit entangled states using superconducting phase qubits. *Nature*, 2010, vol. 467, pp. 570–573. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature09418>.
- [32] Gong M. [et al.] Genuine 12-qubit entanglement on a superconducting quantum processor. *Physical Review Letters*, 2019, vol. 122, issue 11, Article number 110501. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.110501>.
- [33] Song C. [et al.] 10-qubit entanglement and parallel logic operations with a superconducting circuit. *Physical Review Letters*, 2017, vol. 119, issue 18, Article number 180511. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.180511>.
- [34] Li D., Cheng M., Li X., Li S. A relation among tangle, 3-tangle, and von Neumann entropy of entanglement for three qubits. *Quantum Information Processing*, 2023, vol. 22, Article number 14. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11128-022-03759-4>.
- [35] Yu T., Eberly J.H. Sudden death of entanglement. *Science*, 2009, vol. 323, issue 5914, pp. 598–601. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1167343>.
- [36] Wang F. [et al.] Observation of entanglement sudden death and rebirth by controlling a solid-state spin bath. *Physical Review B*, 2018, vol. 98, issue 6, Article number 064306. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.064306>.
- [37] Sun G., Zhou Z., Mao B., Wen X., Wu P., Han S. Entanglement dynamics of a superconducting phase qubit coupled to a two-level system. *Physical Review B*, 2012, vol. 86, Issue 6, Article number 064502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.064502>.
- [38] Salles A., de Melo F., Almeida M. P., Hor-Meyll M., Walborn S.P., Souto Ribeiro P. H., Davidovich L. Experimental investigation of the dynamics of entanglement: Sudden death, complementarity, and continuous monitoring of the environment. *Physical Review*, 2008. vol. A78, number 022322. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.022322>.
- [39] Bagrov A.R., Bashkirov E.K. Sudden death of entanglement in a thermal three-qubit Tavis-Cummings model. *Proceedings of the 9th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology*, 2023, Article number 23240901. DOI: <https://doi.org/10.1109/ITNT57377.2023.10139206>.
- [40] Jozsa R. Fidelity for mixed quantum states. *Journal of Modern Optics*, 1994, vol. 41, issue 12, pp. 2315–2323. DOI: <https://doi.org/10.1080/09500349414552171>.



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-96-111

УДК 539.126.4

Дата: поступления статьи: 23.11.2023
после рецензирования: 26.12.2023
принятия статьи: 28.02.2024

А.В. Карпишков

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: karpishkoff@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0762-5532>

В.А. Салеев

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: saleev@samsu.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0505-5564>

К.К. Шилиев

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: kirill.k.shilyaev@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-0531-883X>

РОЖДЕНИЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ J/ψ НА КОЛЛАЙДЕРЕ NICA В НРКХД И ОБОБЩЕННОЙ ПАРТОННОЙ МОДЕЛИ¹

АННОТАЦИЯ

В статье рассмотрено рождение J/ψ и ψ' мезонов в рамках нерелятивистской квантовой хромодинамики и обобщенной партонной модели. Из имеющихся экспериментальных данных ($\sqrt{s} = 200$ ГэВ и $\sqrt{s} = 19.4$ ГэВ) по рождению этих состояний чармония извлечены октетные непертурбативные матричные элементы и средние значения квадратов поперечных импульсов начальных партоннов, которые далее использованы для предсказания сечения рождения неполяризованных чармониев и поляризации J/ψ и ψ' при энергии $\sqrt{s} = 27$ ГэВ ускорителя NICA.

Ключевые слова: физика высоких энергий; квантовая хромодинамика; чармоний; спин; поляризация; нерелятивистская квантовая хромодинамика; коллинеарная партонная модель; обобщенная партонная модель; SPD NICA.

Цитирование. Карпишков А.В., Салеев В.А., Шилиев К.К. Рождение поляризованных J/ψ на коллайдере NICA в НРКХД и обобщенной партонной модели // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 96–111. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-96-111>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Карпишков А.В., Салеев В.А., Шилиев К.К., 2024

Антон Витальевич Карпишков — кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Владимир Анатольевич Салеев — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Кирилл Константинович Шилиев — магистрант кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

¹Работа выполнена при поддержке гранта ОИЯИ.

Введение

Экспериментальное исследование процессов рождения тяжелых кваркониев дает уникальные возможности для изучения относительной роли жестких процессов, описываемых в рамках теории возмущений квантовой хромодинамики (КХД), и непертурбативных моделей адронизации. Рождение поляризованных состояний J/ψ мезонов является прецизионным тестом для моделей, описывающих адронизацию тяжелых кварков в кваркониях: модели цветовых синглетов (МЦС) [1], нерелятивистской КХД (НРКХД) [2] и модели испарения цвета (МИЦ) [3]. Существующие экспериментальные данные по рождению поляризованных J/ψ получены в протон-протонных и антипротон-протонных столкновениях при высоких энергиях от $\sqrt{s} = 200$ ГэВ [4] до $\sqrt{s} = 1.96$ ТэВ [5] и $\sqrt{s} = 13$ ТэВ [6]. Удовлетворительного описания данных не получено ни в одной из моделей адронизации [7]. В этой связи представляет интерес изучение рождения поляризованных J/ψ при энергиях коллайдера NICA, $\sqrt{s} = 27$ ГэВ [8] и теоретические предсказания для спектров поляризованных J/ψ мезонов, полученных в различных подходах факторизации и моделях адронизации. В работе [9] были сделаны предсказания в модели адронизации НРКХД, выполненные в коллинеарной партонной модели [10] и подходе реджезации партонов [11]. В данной статье мы изучаем рождение поляризованных J/ψ в обобщенной партонной модели (ОПМ) и НРКХД впервые.

1. Неколлинеарная модель факторизации

Стандартным методом рассмотрения партонных подпроцессов и способом факторизации сечения жесткого адронного процесса является коллинеарная партонная модель (КПМ), имеющая известный ряд недостатков, в частности — расходимость сечения в области малых поперечных импульсов рождающейся частицы. Один из способов включить в описание область малых импульсов — это подход TMD-факторизации (transverse-momentum-dependence) [12], в котором подразумевается, что начальные партоны обладают ненулевыми поперечными компонентами импульсов. Область применения строгой TMD-факторизации ограничивается малыми значениями поперечных импульсов чармония $p_T \ll \mu_F$, где μ_F — энергетический масштаб факторизации партонного подпроцесса.

ОПМ можно назвать феноменологической реализацией идеи TMD-факторизации. Если в КПМ импульсы начальных партонов описываются как продольные компоненты импульсов летящих друг навстречу другу протонов, то в ОПМ вводятся в рассмотрение ненулевые поперечные компоненты импульсов начальных партонов.

Описывая столкновение протонов с импульсами p_1 и p_2 , обозначим импульсы партонов в соответствующих протонах как q_1 и q_2 . Будем явно выделять их поперечные компоненты q_{1T} , q_{2T} , тогда импульсы начальных партонов могут быть записаны в виде

$$q_1^\mu = x_1 p_1^\mu + y_1 p_2^\mu + q_{1T}^\mu, \quad q_2^\mu = x_2 p_2^\mu + y_2 p_1^\mu + q_{2T}^\mu, \quad q_{iT}^\mu = (0, \vec{q}_{iT}, 0), \quad i = 1, 2,$$

где x и y — это доли импульсов протонов. Здесь ради сохранения калибровочной инвариантности (то есть выполнения условия $q_1^2 = q_2^2 = 0$) в импульсы партонов искусственно добавлены слагаемые, пропорциональные импульсам летящих им навстречу протонов. Условие калибровочной инвариантности требует, чтобы начальные партоны были на массовой поверхности, что позволяет найти выражения для долей импульса y :

$$y_i = \frac{t_i}{sx_i}, \quad t_i = \vec{q}_{iT}^2, \quad i = 1, 2.$$

Компоненты импульсов q_1 , q_2 могут быть представлены следующим образом:

$$q_1^\mu = \left(\frac{x_1 \sqrt{s}}{2} + \frac{t_1}{2\sqrt{s}x_1}, \vec{q}_{1T}, \frac{x_1 \sqrt{s}}{2} - \frac{t_1}{2\sqrt{s}x_1} \right)^\mu, \\ q_2^\mu = \left(\frac{x_2 \sqrt{s}}{2} + \frac{t_2}{2\sqrt{s}x_2}, \vec{q}_{2T}, -\frac{x_2 \sqrt{s}}{2} + \frac{t_2}{2\sqrt{s}x_2} \right)^\mu.$$

Сечение процесса в рамках подхода КПМ, согласно теореме о факторизации, может быть представлено как произведение сечения жесткого партонного подпроцесса и партонных функций распределения (ПФР), которые описывают вероятность партона иметь ту или иную долю импульса x . Строго эта теорема доказана для КПМ, но не для ОПМ [12], однако используется для факторизации сечения и для процесса рождения чармония в столкновении протонов записывается в виде

$$d\sigma(pp \rightarrow CX) = \int dx_1 \int d^2q_{1T} F_1(x_1, \mu_F^2, q_{1T}) \int dx_2 \int d^2q_{2T} F_2(x_2, \mu_F^2, q_{2T}) d\hat{\sigma},$$

где $d\hat{\sigma}$ — сечение жесткого партонного подпроцесса, которое соответственно для подпроцессов $2 \rightarrow 1$ и $2 \rightarrow 2$ выражается следующим образом:

$$d\hat{\sigma}(ab \rightarrow C) = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(q_1 + q_2 - k_1) \frac{|\overline{\mathcal{M}}|^2}{I} \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3 2k_{10}},$$

$$d\hat{\sigma}(ab \rightarrow Cd) = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(q_1 + q_2 - k_1 - k_2) \frac{|\overline{\mathcal{M}}|^2}{I} \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3 2k_{10}} \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3 2k_{20}},$$

здесь k_i — импульсы конечных частиц, I — потоковый фактор, а $|\overline{\mathcal{M}}|^2$ — усредненный по конечным спиновым и цветовым состояниям и суммированный по начальным квадрат модуля амплитуды партонного подпроцесса. Партонные функции распределения $F(x, \mu_F^2, q_T)$ в ОПМ-факторизации представляются в форме произведения не зависящих от поперечного импульса коллинеарных партонных распределений и множителей, включающих данную зависимость:

$$F(x, \mu_F^2, q_T) = f(x, \mu_F^2) G(q_T),$$

используемый нами анзац для функции $G(q_T)$ имеет гауссову форму с соответствующим нормировочным условием [13]:

$$G(q_T) = \frac{e^{-q_T^2/\langle q_T^2 \rangle}}{\pi \langle q_T^2 \rangle}, \quad \int G(q_T) d^2 q_T = 1.$$

Значение феноменологического параметра $\langle q_T^2 \rangle$, имеющего смысл среднего значения квадрата поперечного импульса начальных партонов, традиционно берется равным около 1 ГэВ² [14], мы же, исходя из зависимости величины $\langle q_T^2 \rangle$ от энергии столкновения, извлечем в дальнейшем его значение из экспериментальных данных.

2. Нерелятивистская квантовая хромодинамика

Основная идея нерелятивистской квантовой хромодинамики (НРКХД) состоит в разложении волновой функции тяжелого кваркония в ряд по степеням малого параметра, роль которого выполняет относительная скорость конститuentных кварков v [2]. Соотношение между кинетической и потенциальной энергией, которая для достаточно больших масс кваркония M подавляется членом, пропорциональным α_s/r , показывает, что относительная скорость v пропорциональна сильной константе связи α_s , которая в свою очередь с ростом M логарифмически уменьшается, так как $\alpha_s \sim 1/\ln M$. Так что для чармония, для которого $v^2 \approx 0.3$, возможно введение системы масштабов, характеризующих состояния кваркония с определенным набором квантовых чисел через значения специфических динамических величин [15]. Так, значения массы кваркония M (характеризующее энергию основного состояния), трехмерного импульса Mv (обратно пропорционального размеру основного состояния) и кинетической энергии с точностью до числового множителя Mv^2 (которая определяет величину расщепления между уровнями радиального и углового возбуждений) удовлетворяют неравенству $M^2 \gg (Mv)^2 \gg (Mv^2)^2$ и позволяют реализовать разложение волновой функции основного состояния чармония

$$|J/\psi\rangle = \mathcal{O}(v^0) |c\bar{c}[{}^3S_1^{(1)}]\rangle + \mathcal{O}(v^1) |c\bar{c}[{}^3P_J^{(8)}]g\rangle + \mathcal{O}(v^2) |c\bar{c}[{}^3S_1^{(1,8)}]gg\rangle + \mathcal{O}(v^2) |c\bar{c}[{}^1S_0^{(8)}]g\rangle + \dots$$

Если ограничиться лишь слагаемым лидирующего по v порядка, то в итоговое сечение внесет вклад только рождение синглетных по цвету состояний чармония, данное приближение носит название модели цветовых синглетов (МЦС).

Подход НРКХД также позволяет осуществить факторизацию жесткого сечения [2], которое распадается на произведение сечения рождения кварк-антикварковой пары в некотором состоянии, определяемом соответствующим набором квантовых чисел, и непертурбативного матричного элемента (НМЭ), отвечающего за адронизацию кварк-антикварковой пары в кварконий (здесь c обозначает очарованный кварк, а суммирование проводится по фоковским состояниям, обозначенным для краткости n):

$$d\hat{\sigma}(ab \rightarrow CX) = \sum_n d\hat{\sigma}(ab \rightarrow c\bar{c}[n]X) \langle \mathcal{O}^C[n] \rangle / (N_{\text{col}} N_{\text{pol}}),$$

где $N_{\text{col}} = 2N_c$ для синглетных состояний, $N_{\text{col}} = N_c^2 - 1$ для октетных и $N_{\text{pol}} = 2J + 1$ ($N_c = 3$ — число учитываемых цветов, J — полный момент кварк-антикварковой пары). НМЭ синглетных состояний могут быть получены в потенциальных моделях тяжелых кваркониев [16], они связаны со значениями волновой функции чармония или ее производной в нуле:

$$\langle \mathcal{O}^C[{}^3S_1^{(1)}] \rangle = 2N_c(2J + 1) |\Psi(0)|^2, \quad \langle \mathcal{O}^C[{}^3P_J^{(1)}] \rangle = 2N_c(2J + 1) |\Psi'(0)|^2.$$

Подобный подход не применим к октетным НМЭ, значения которых извлекаются из экспериментальных данных.

Вычисление амплитуд в НРКХД осуществляется с помощью последовательности проецирований. Проекторы на состояния со значениями спина 0 и 1 имеют вид [17]

$$\Pi_0 = \frac{1}{\sqrt{8m_c^3}} \left(\frac{\hat{P}}{2} - \hat{q} - m_c \right) \gamma^5 \left(\frac{\hat{P}}{2} + \hat{q} + m_c \right), \quad \Pi_1^\mu = \frac{1}{\sqrt{8m_c^3}} \left(\frac{\hat{P}}{2} - \hat{q} - m_c \right) \gamma^\mu \left(\frac{\hat{P}}{2} + \hat{q} + m_c \right),$$

где m_c — это масса c -кварка, P — полный импульс кварка и антикварка, а q — их относительный импульс. Проекторы на цветовые состояния — синглетное и октетное соответственно:

$$C_1 = \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{N_c}}, \quad C_8 = \sqrt{2}T_{ij}^a,$$

где δ_{ij} — дельта Кронекера, T_{ij}^a — генераторы фундаментального представления цветовой группы $SU(3)$, а $N_c = 3$. Окончательное проецирование на состояние с определенным значением углового момента производится с помощью взятия следа и производной по относительному импульсу q порядка, равного орбитальному квантовому числу (с последующим занулением q). Поэтому амплитуды рождения $c\bar{c}$ -пар могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c}[{}^3S_1^{(1)}]) &= \text{Tr}[C_1 \Pi_1^\mu \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c}) \varepsilon_\mu(J_z, P)]|_{q=0}, \\ \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c}[{}^3P_J^{(1)}]) &= \frac{d}{dq_\nu} \text{Tr}[C_1 \Pi_1^\mu \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c}) \varepsilon_{\mu\nu}^{(J)}(J_z, P)]|_{q=0}, \\ \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c}[{}^1S_0^{(8)}]) &= \text{Tr}[C_8 \Pi_0 \mathcal{M}(a + b \rightarrow c\bar{c})]|_{q=0}, \end{aligned}$$

здесь приведены характерные амплитуды рождения пар. Обозначение \mathcal{M} внутри знаков следа соответствует амплитуде рождения пары с "отрезанными" линиями конечных кварков, $\varepsilon(J_z, P)$ — это вектор или тензор поляризации.

Суммирование по поляризациям в процессе получения квадрата модуля амплитуды неполяризованного 3S_1 состояния чармония осуществляется с помощью поляризационного тензора

$$\mathcal{P}_{\mu\nu} = \sum_{J_z} \varepsilon_\mu(J_z, P) \varepsilon_\nu^*(J_z, P) = -g_{\mu\nu} + \frac{P_\mu P_\nu}{M^2}.$$

Для неполяризованных 3P_J состояний тензоры имеют следующий вид ($J = 0, 1, 2$):

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma} &= \varepsilon_{\mu\nu}^{(0)}(P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(0)*}(P) = \frac{1}{3} \mathcal{P}_{\mu\nu} \mathcal{P}_{\rho\sigma}, \\ \mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma} &= \sum_{J_z} \varepsilon_{\mu\nu}^{(1)}(J_z, P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(1)*}(J_z, P) = \frac{1}{2} [\mathcal{P}_{\mu\rho} \mathcal{P}_{\nu\sigma} - \mathcal{P}_{\mu\sigma} \mathcal{P}_{\rho\nu}], \\ \mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma} &= \sum_{J_z} \varepsilon_{\mu\nu}^{(2)}(J_z, P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(2)*}(J_z, P) = \frac{1}{2} [\mathcal{P}_{\mu\rho} \mathcal{P}_{\nu\sigma} + \mathcal{P}_{\mu\sigma} \mathcal{P}_{\rho\nu}] - \frac{1}{3} \mathcal{P}_{\mu\nu} \mathcal{P}_{\rho\sigma}. \end{aligned}$$

Кроме того, в работе изучаются и поляризованные состояния чармония. Для определения направления спина нами выбрана система отсчета, связанная со спиральностью кваркония (helicity frame); в этой системе вектор продольной поляризации направлен вдоль трехмерного импульса кваркония. Приведем выражения тензоров и для суммирования по состояниям с выделенной поляризацией. Процедура построения вектора продольной поляризации описана в работе, а его явное выражение и соответствующий тензор для 3S_1 состояния [18]:

$$\varepsilon_\mu(0, P) = \frac{(PQ)P_\mu/M - MQ_\mu}{\sqrt{(PQ)^2 - sM^2}}, \quad \mathcal{P}_{\mu\nu}^0 = \varepsilon_\mu(0, P) \varepsilon_\nu^*(0, P),$$

где Q — сумма импульсов сталкивающихся адронов (в нашем случае протонов) и $s = Q^2$. Поляризованное 3P_1 состояние вычислялось с помощью процедуры, описанной в работе [19]. Тензоры для поляризованных 3P_2 состояний, проекция J_z указана у тензоров верхним индексом [20]:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma}^0 &= \varepsilon_{\mu\nu}^{(2)}(0, P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(2)*}(0, P) = \frac{1}{6} [2\mathcal{P}_{\mu\nu}^0 - \mathcal{P}_{\mu\nu}^1] [2\mathcal{P}_{\rho\sigma}^0 - \mathcal{P}_{\rho\sigma}^1], \quad \mathcal{P}_{\mu\nu}^1 = \mathcal{P}_{\mu\nu} - \mathcal{P}_{\mu\nu}^0, \\ \mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma}^1 &= \sum_{|J_z|=1} \varepsilon_{\mu\nu}^{(2)}(J_z, P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(2)*}(J_z, P) = \frac{1}{2} [\mathcal{P}_{\mu\rho}^0 \mathcal{P}_{\nu\sigma}^1 + \mathcal{P}_{\mu\sigma}^0 \mathcal{P}_{\rho\nu}^1 + \mathcal{P}_{\nu\sigma}^0 \mathcal{P}_{\mu\rho}^1 + \mathcal{P}_{\nu\rho}^0 \mathcal{P}_{\mu\sigma}^1], \end{aligned}$$

$$\mathcal{P}_{\mu\nu\rho\sigma}^2 = \sum_{|J_z|=2} \varepsilon_{\mu\nu}^{(2)}(J_z, P) \varepsilon_{\rho\sigma}^{(2)*}(J_z, P) = \frac{1}{2} [\mathcal{P}_{\mu\rho}^1 \mathcal{P}_{\nu\sigma}^1 + \mathcal{P}_{\mu\sigma}^1 \mathcal{P}_{\rho\nu}^1 - \mathcal{P}_{\mu\nu}^1 \mathcal{P}_{\rho\sigma}^1].$$

Также следует обратить внимание на учет распадов вышележащих энергетических состояний в рождении чармония. Для получения сечения неполяризованного J/ψ проводится суммирование по сечениям рождения возбужденных состояний, умноженным на бранчинг распада данного состояния в основное, причем вычисление проводится с учетом эффекта отдачи, а именно — выражения для сдвига по поперечному импульсу основного состояния: $p_{TC} \approx (M_C/M_{C'}) \cdot p_{TC'}$. Учет распадов в рождении продольно поляризованного состояния J/ψ устроен сложнее, далее приведено полное выражение для этого сечения [19]:

$$\sigma_L^{J/\psi} = \sigma_L^{J/\psi, \text{прямое}} + \sigma_L^{\chi_{cJ}} + \sigma_L^{\psi'} + \sigma_L^{\psi' \rightarrow \chi_{cJ}},$$

каждое из слагаемых само представлено суммой сечений:

$$\begin{aligned} \sigma_L^{J/\psi(\psi'), \text{прямое}} &= \sigma_0^{J/\psi(\psi')} ({}^3S_1^{(1)}) + \sigma_0^{J/\psi(\psi')} ({}^3S_1^{(8)}) + \frac{1}{3} \sigma^{J/\psi(\psi')} ({}^1S_0^{(8)}) + \\ &+ \frac{1}{3} \sigma^{J/\psi(\psi')} ({}^3P_0^{(8)}) + \frac{1}{2} \sigma_1^{J/\psi(\psi')} ({}^3P_1^{(8)}) + \frac{2}{3} \sigma_0^{J/\psi(\psi')} ({}^3P_2^{(8)}) + \frac{1}{2} \sigma_1^{J/\psi(\psi')} ({}^3P_2^{(8)}), \\ \sigma_L^{\chi_{cJ}} &= \left[\frac{1}{3} \sigma^{\chi_{c0}} ({}^3P_0^{(1)}) + \frac{1}{3} \sigma^{\chi_{c0}} ({}^3S_1^{(8)}) \right] \text{Br}(\chi_{c0} \rightarrow J/\psi + \gamma) + \\ &+ \left[\frac{1}{2} \sigma_1^{\chi_{c1}} ({}^3P_1^{(1)}) + \frac{1}{2} \sigma_0^{\chi_{c1}} ({}^3S_1^{(8)}) + \frac{1}{4} \sigma_1^{\chi_{c1}} ({}^3S_1^{(8)}) \right] \text{Br}(\chi_{c1} \rightarrow J/\psi + \gamma) + \\ &+ \left[\frac{2}{3} \sigma_0^{\chi_{c2}} ({}^3P_2^{(1)}) + \frac{1}{2} \sigma_1^{\chi_{c2}} ({}^3P_2^{(1)}) + \frac{17}{30} \sigma_0^{\chi_{c2}} ({}^3S_1^{(8)}) + \frac{13}{60} \sigma_1^{\chi_{c2}} ({}^3S_1^{(8)}) \right] \text{Br}(\chi_{c2} \rightarrow J/\psi + \gamma), \end{aligned}$$

$$\sigma_L^{\psi'} = \sigma_L^{\psi', \text{прямое}} \text{Br}(\psi' \rightarrow J/\psi + X),$$

$$\begin{aligned} \sigma_L^{\psi' \rightarrow \chi_{cJ}} &= \frac{1}{3} \sigma_L^{\psi', \text{прямое}} \text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c0} + \gamma) \text{Br}(\chi_{c0} \rightarrow J/\psi + \gamma) + \\ &+ \left[\frac{1}{2} \sigma_L^{\psi', \text{прямое}} + \frac{1}{4} \sigma_T^{\psi', \text{прямое}} \right] \text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c1} + \gamma) \text{Br}(\chi_{c1} \rightarrow J/\psi + \gamma) + \\ &+ \left[\frac{17}{30} \sigma_L^{\psi', \text{прямое}} + \frac{13}{60} \sigma_T^{\psi', \text{прямое}} \right] \text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c2} + \gamma) \text{Br}(\chi_{c2} \rightarrow J/\psi + \gamma). \end{aligned}$$

Нижние индексы L и T соответствуют продольной и поперечной поляризациям состояний.

3. Результаты расчетов

Приведем перечень инструментов, использованных для вычислений. В первую очередь, по процедуре, описанной в предыдущей части, были получены квадраты модулей амплитуд партонных подпроцессов, рассматриваемых ниже; их вычисление проводилось в системе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica с применением пакетов FeynCalc [21] и FeynArts [22]. Численное интегрирование сечений проводилось с помощью библиотеки численного интегрирования CUBA и алгоритма интегрирования Suave [23]. В качестве коллинеарных ПФР были взяты численно заданные функции MSTW2008LO [24]. Относительная погрешность всех вычислений не превышала 1 %.

Вычисление всех вкладов в рождение J/ψ было проведено в лидирующем порядке теории возмущений по бегущей константе связи α_s . Среди партонных подпроцессов $2 \rightarrow 1$ и $2 \rightarrow 2$, дающих вклад как в прямое рождение J/ψ , так и через промежуточные вышележащие состояния, выделим те, в которых рождаются синглетные состояния чармония, и те, в которых — октетные состояния:

$$\begin{aligned} g + g &\rightarrow \chi_{cJ} [{}^3P_J^{(1)}], & J = 0, 2, & & g + g &\rightarrow J/\psi [{}^1S_0^{(8)}], \\ g + g &\rightarrow J/\psi [{}^3S_1^{(1)}] + g, & & & g + g &\rightarrow J/\psi [{}^3P_J^{(8)}], & J = 0, 2, \\ g + g &\rightarrow \psi' [{}^3S_1^{(1)}] + g, & & & q + \bar{q} &\rightarrow J/\psi [{}^3S_1^{(8)}], \\ g + g &\rightarrow \chi_{c1} [{}^3P_1^{(1)}] + g, & & & q + \bar{q} &\rightarrow \chi_{cJ} [{}^3S_1^{(8)}], & J = 0, 2. \end{aligned}$$

В качестве начальных партонных учитывались глюоны g и кварки q (\bar{q}). Здесь не указаны подпроцессы $2 \rightarrow 1$, которым отвечают равные нулю матричные элементы синглетных состояний. В вычислениях массы состояний чармония принимались следующими [25]: $m_{J/\psi} = 3.096$ ГэВ, $m_{\psi'} = 3.686$ ГэВ,

$m_{\chi_{c0}} = 3.415$ ГэВ, $m_{\chi_{c1}} = 3.510$ ГэВ, $m_{\chi_{c2}} = 3.556$ ГэВ. Распады состояний чармония в J/ψ и распады J/ψ в пары электрон-позитрон или мюон-антимюон учитывались бранчингами — дополнительными феноменологическими множителями, на которые домножались соответствующие сечения [25]: $\text{Br}(\chi_{c0} \rightarrow J/\psi + \gamma) = 0.014$, $\text{Br}(\chi_{c1} \rightarrow J/\psi + \gamma) = 0.343$, $\text{Br}(\chi_{c2} \rightarrow J/\psi + \gamma) = 0.19$, $\text{Br}(\psi' \rightarrow J/\psi + X) = 0.614$, $\text{Br}(J/\psi \rightarrow e^+e^-) = 0.05971$, $\text{Br}(J/\psi \rightarrow \mu^+\mu^-) = 0.05961$, $\text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c0} + \gamma) = 0.0979$, $\text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c1} + \gamma) = 0.0975$, $\text{Br}(\psi' \rightarrow \chi_{c2} + \gamma) = 0.0952$. Значения НМЭ, которые в НРКХД соответствуют адронизации рождающейся пары очарованных кварков, были взяты следующими [26]: $\langle \mathcal{O}^{J/\psi}[{}^3S_1^{(1)}] \rangle = 1.3$ ГэВ³, $\langle \mathcal{O}^{\psi'}[{}^3S_1^{(1)}] \rangle = 0.65$ ГэВ³, $\langle \mathcal{O}^{\chi_{c0}}[{}^3P_0^{(1)}] \rangle = 0.089$ ГэВ⁵, также использовались соотношения для НМЭ, справедливые в лидирующем порядке НРКХД по v и отражающие спиновую симметрию тяжелых кварков:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}^{\chi_{cJ}}[{}^3P_J^{(1)}] \rangle &= (2J + 1) \cdot \langle \mathcal{O}^{\chi_{c0}}[{}^3P_0^{(1)}] \rangle, \\ \langle \mathcal{O}^{J/\psi}[{}^3P_J^{(8)}] \rangle &= (2J + 1) \cdot \langle \mathcal{O}^{J/\psi}[{}^3P_0^{(8)}] \rangle, \\ \langle \mathcal{O}^{\chi_{cJ}}[{}^3S_1^{(8)}] \rangle &= (2J + 1) \cdot \langle \mathcal{O}^{\chi_{c0}}[{}^3S_1^{(8)}] \rangle. \end{aligned}$$

При расчетах в качестве масштаба перенормировки μ_R , входящего в выражение для константы связи α_s , и масштаба факторизации μ_F , от которого зависят ПФР, была принята поперечная масса чармония $m_T = \sqrt{m^2 + p_T^2}$. Так как выбор величины для масштабов является довольно свободным, то для оценки коридора ошибок теоретических предсказаний масштаб варьировался на множитель 2 в большую и меньшую сторону, коридор погрешностей на графиках будет показан светлой полосой того же цвета, что и основная линия.

Для предсказания рождения и поляризации J/ψ в протон-протонных столкновениях на ускорителе NICA при энергии $\sqrt{s} = 27$ ГэВ сначала были проведены вычисления и сравнения для того же процесса при других энергиях, мы использовали результаты измерений коллабораций PHENIX ($\sqrt{s} = 200$ ГэВ) [27] и NA3 ($\sqrt{s} = 19.4$ ГэВ) [28]. Для описания рождения J/ψ в интервале малых быстрот $|y| < 0.35$ и при $p_T \ll 3$ ГэВ было достаточно синглетного вклада при традиционном значении $\langle q_T^2 \rangle_g = 1$ ГэВ². Однако его оказалось достаточно для описания данных измерений вплоть до $p_T \lesssim 3$ ГэВ, то есть во всей области применимости ОПМ, мы фитировали на этих экспериментальных данных для рождения J/ψ сам параметр $\langle q_T^2 \rangle_g$, значение которого чувствительно к энергии процесса: $\langle q_T^2 \rangle_g = 2.80$ ГэВ², $\chi^2/\text{d.o.f.} = 0.18$, а расчеты отображены на графике (рис. 3.1) с указанием вкладов различных синглетных состояний в суммарное сечение J/ψ .

Также были фитированы данные измерений коллаборации PHENIX [27] для больших быстрот $1.2 < |y| < 2.2$ и данные коллаборации NA3 [28]. Для описания этих экспериментов синглетного вклада было недостаточно, поэтому учитывался вклад от октетных состояний с начальными глюонами и кварками, так как состояние ${}^3S_1^{(8)}$ в процессах с начальными глюонами не рождается. Следовательно, появился целый ряд новых параметров для фитирования: $\langle q_T^2 \rangle_q$ (помимо аналогичного глюонного параметра) и октетные НМЭ, причем вклады от рождения J/ψ в процессах $2 \rightarrow 1$ в состояниях ${}^1S_0^{(8)}$, ${}^3P_0^{(8)}$, ${}^3P_2^{(8)}$ имеют одинаковую зависимость от p_T , то есть пропорциональны друг другу, поэтому соответствующие им НМЭ могут быть извлечены из экспериментальных данных только в виде линейной комбинации $M_7^{J/\psi} = \langle \mathcal{O}^{J/\psi}[{}^1S_0^{(8)}] \rangle + 7 \cdot \langle \mathcal{O}^{J/\psi}[{}^3P_0^{(8)}] \rangle / m_c^2$. Значения всех параметров, фитированных на данных PHENIX и NA3, расположены в табл. 3.1, а результаты наших расчетов — на рис. 3.2 и рис. 3.3. Как видно, вклад октетных состояний (в процессах с начальными глюонами) становится сравним с синглетным вкладом и даже превышает его, а в случае с данными NA3 — он один почти полностью описывает эксперимент, поэтому во всяком случае при больших y октетный вклад не может быть проигнорирован.

Для расчета предсказаний поляризации ψ' мы фитировали и данные PHENIX по рождению ψ' при $\sqrt{s} = 200$ ГэВ [27]. Параметры, относящиеся к ОПМ, были взяты из фитирования данных по рождению J/ψ (табл. 3.1), так как они не должны зависеть от процесса, а октетные НМЭ, в частности $M_7^{\psi'} = \langle \mathcal{O}^{\psi'}[{}^1S_0^{(8)}] \rangle + 7 \cdot \langle \mathcal{O}^{\psi'}[{}^3P_0^{(8)}] \rangle / m_c^2$ и $\langle \mathcal{O}^{\psi'}[{}^3P_1^{(8)}] \rangle$, были фитированы, и результаты этих расчетов помещены в табл. 3.2 и на рис. 3.4.

Перейдем к предсказаниям рождения J/ψ при энергии эксперимента SPD NICA. В расчетах учитывались вклады и использовались параметры, фитированные на данных измерений коллаборации NA3 из-за близости энергии \sqrt{s} этих двух экспериментов. На рис. 3.5 и 3.6 показаны результаты расчетов для дифференциального сечения рождения J/ψ как функций поперечного импульса p_T и быстроты y соответственно.

Кроме того, мы сравнили наши вычисления для сечения рождения J/ψ в ОПМ с конвенциональными расчетами в КПМ. Аналогично были фитированы данные коллабораций PHENIX и NA3 для $p_T > 2$ ГэВ. Так же, как и в ОПМ, часть октетных НМЭ может быть фитирована лишь в виде линейной комбинации, однако она будет иной, так как в КПМ не существует процессов $2 \rightarrow 1$, и все состояния могут рождаться только в процессах $2 \rightarrow 2$. Анализ показывает, что отношение вкладов состояний ${}^1S_0^{(8)}$, ${}^3P_0^{(8)}$, ${}^3P_1^{(8)}$,

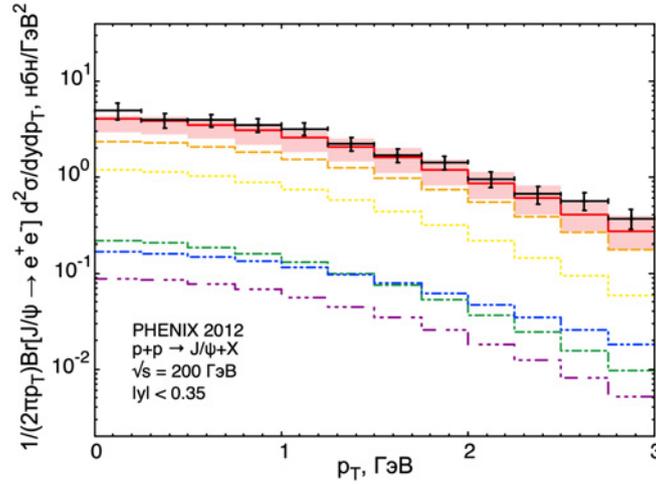


Рис. 3.1. Зависимость дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса чармония p_T . Красная сплошная линия соответствует суммарному сечению, в которое входят сечение прямого рождения J/ψ (оранжевая штриховая линия) и вклады от распадов χ_{c2} (желтая пунктирная), ψ' (зеленая штрихпунктирная), χ_{c1} (синяя штрихпунктирная с двумя точками) и χ_{c0} (фиолетовая штрихпунктирная с тремя точками). Экспериментальные данные по рождению J/ψ коллаборации PHENIX [27]

Fig. 3.1. Differential cross section of prompt J/ψ production versus charmonium transverse momentum p_T . Summed J/ψ cross section (red solid line) consists of direct J/ψ production (orange dashed line) and feed-down contributions of χ_{c2} (yellow dotted line), ψ' (green dash-dotted line), χ_{c1} (blue dash-dot-dotted line) and χ_{c0} (purple dash-dot-dot-dotted line). Experimental data is taken from the PHENIX collaboration paper [27]

Таблица 3.1

Результаты фитирования сечения рождения J/ψ в ОПМ на данных коллаборации PHENIX в области больших быстрот $1.2 < |y| < 2.2$ и данных коллаборации NA3 при $y > 0$

Table 3.1

Result of fitting of the prompt J/ψ production within GPM on the PHENIX collaboration data ($1.2 < |y| < 2.2$) and the NA3 collaboration data ($y > 0$)

Эксп. данные	PHENIX [27]	NA3 [28]
$\langle q_T^2 \rangle_g, \text{ ГэВ}^2$	2.80	0.85
$\langle q_T^2 \rangle_q, \text{ ГэВ}^2$	1.30	0.15
$M_7^{J/\psi}, \text{ ГэВ}^3$	$(5.17 \pm 0.33) \cdot 10^{-2}$	
$\langle \mathcal{O}^{J/\psi} [{}^3S_1^{(8)}] \rangle, \text{ ГэВ}^3$	$(0.00 \pm 0.26) \cdot 10^{-2}$	
$\langle \mathcal{O}^{\chi_{c0}} [{}^3S_1^{(8)}] \rangle, \text{ ГэВ}^3$	$(4.12 \pm 3.55) \cdot 10^{-3}$	
$\chi^2/\text{d.o.f}$	0.52	

${}^3P_2^{(8)}$ в КПМ остается одинаковым только при достаточно больших p_T . Другими словами, рассмотрим отношение

$$\mathcal{R}(p_T) = \frac{\sum_{J=0,1,2} d\sigma(ab \rightarrow c\bar{c} [{}^3P_J^{(8)}] \rightarrow J/\psi)}{d\sigma(ab \rightarrow c\bar{c} [{}^1S_0^{(8)}] \rightarrow J/\psi)},$$

в нашем случае на интервале по p_T от 2 до 3 ГэВ отношение $\mathcal{R}(p_T)$ немного больше 3, то есть для фитирования данных и последующей оценки предсказаний КПМ будем использовать комбинацию $M_3^{J/\psi} = \langle \mathcal{O}^{J/\psi} [{}^1S_0^{(8)}] \rangle + 3 \cdot \langle \mathcal{O}^{J/\psi} [{}^3P_0^{(8)}] \rangle / m_c^2$. Результаты фитирования октетных НМЭ указаны в табл. 3.3, а расчеты для данных PHENIX и NA3 и предсказания для SPD NICA помещены на рис. 3.7–3.8 вместе с аналогичными расчетами в ОПМ. Как видно, в области малых быстрот, где сосредоточена основная доля рождающихся J/ψ , предсказания в КПМ, по крайней мере в лидирующем порядке по α_s , не со-

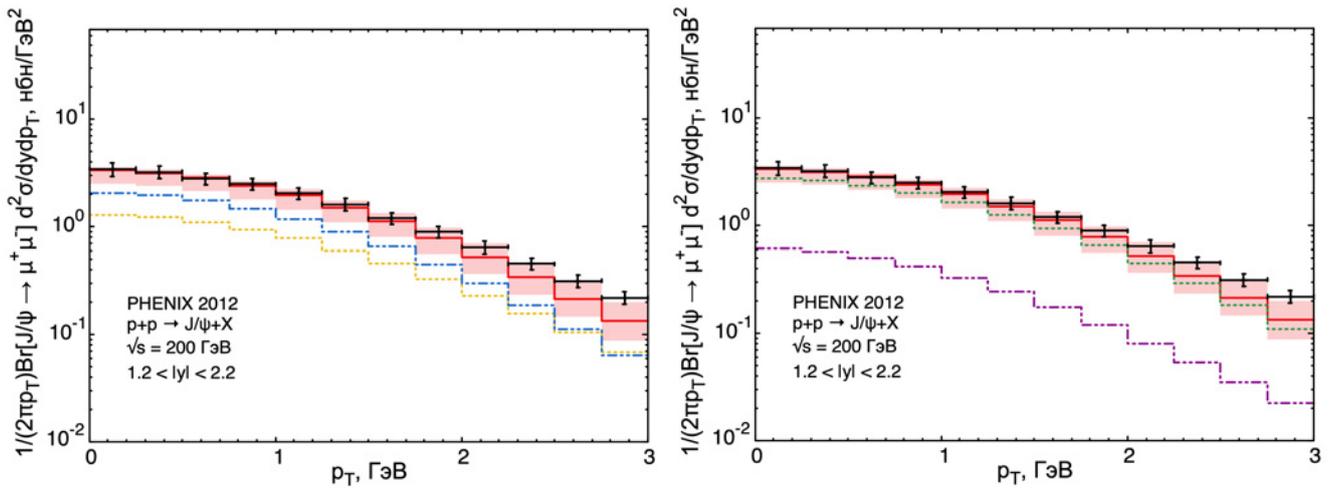


Рис. 3.2. Зависимость дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса чармония p_T в сравнении с экспериментальными данными коллаборации PHENIX [27]. Слева показано сравнение полного синглетного (желтая пунктирная линия) и октетного (синяя штрихпунктирная с двумя точками) вкладов в рождение J/ψ . Справа — сравнение прямого рождения J/ψ (зеленая пунктирная) и вклада от распадов возбужденных состояний чармония (фиолетовая штрихпунктирная с двумя точками). Красная сплошная линия в обоих случаях отвечает суммарному сечению J/ψ

Fig. 3.2. Differential cross section of prompt J/ψ production versus charmonium transverse momentum p_T . Comparison of the singlet (yellow dotted line) and octet (blue dash-dot-dotted line) contributions is shown on the left, comparison of the direct J/ψ production (green dotted line) and feed-down (purple dash-dot-dotted line) contributions is shown on the right. Red solid line refers to summed J/ψ production on both plots. Experimental data is taken from the PHENIX collaboration paper [27]

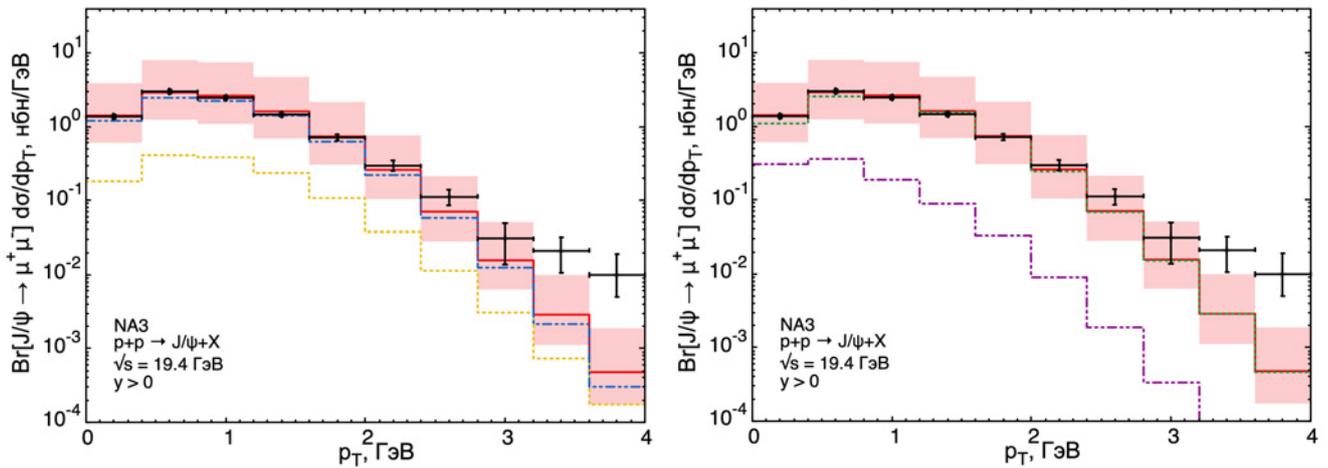


Рис. 3.3. Зависимость дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса чармония p_T в сравнении с экспериментальными данными коллаборации NA3 [28]. Слева показано сравнение полного синглетного (желтая пунктирная линия) и октетного (синяя штрихпунктирная с двумя точками) вкладов в рождение J/ψ . Справа — сравнение прямого рождения J/ψ (зеленая пунктирная) и вклада от распадов возбужденных состояний чармония (фиолетовая штрихпунктирная с двумя точками). Красная сплошная линия в обоих случаях отвечает суммарному сечению J/ψ

Fig. 3.3. Differential cross section of prompt J/ψ production versus charmonium transverse momentum p_T . Comparison of the singlet (yellow dotted line) and octet (blue dash-dot-dotted line) contributions is shown on the left, comparison of the direct J/ψ production (green dotted line) and feed-down (purple dash-dot-dotted line) contributions is shown on the right. Red solid line refers to summed J/ψ production on both plots. Experimental data is taken from the NA3 collaboration paper [28]

Таблица 3.2

Результаты фитирования сечения рождения ψ' в ОПМ на данных коллаборации PHENIX в области быстрот $|y| < 0.35$

Table 3.2

Result of fitting of the prompt ψ' production within GPM on the PHENIX collaboration data at midrapidity area $|y| < 0.35$

Эксп. данные	PHENIX [27]
$M_7^{\psi'}$, ГэВ ³	$(3.65 \pm 3.82) \cdot 10^{-3}$
$\langle \mathcal{O}^{\psi'} [{}^3P_1^{(8)}] \rangle$, ГэВ ⁵	$(0.05 \pm 1.24) \cdot 10^{-1}$
$\chi^2/\text{d.o.f}$	$6.6 \cdot 10^{-3}$

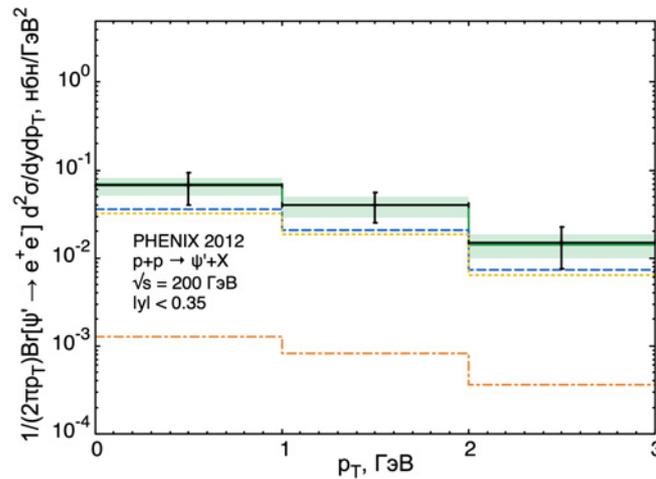


Рис. 3.4. Зависимость дифференциального сечения рождения ψ' от поперечного импульса чармония p_T в сравнении с экспериментальными данными коллаборации PHENIX [27]. Показаны вклады от рождения состояний ${}^3S_1^{(1)}$ (синяя штриховая линия), ${}^3S_1^{(8)}$ (оранжевая штрихпунктирная) и общий не разделяемый фитированием вклад состояний ${}^1S_0^{(8)}$, ${}^3P_0^{(8)}$, ${}^3P_2^{(8)}$ (желтая пунктирная).

Сумма всех вкладов показана сплошной зеленой линией

Fig. 3.4. Differential cross section of prompt ψ' production versus charmonium transverse momentum p_T , contributions of the singlet state ${}^3S_1^{(1)}$ (blue dashed line), octet state ${}^3S_1^{(8)}$ (orange dash-dotted line) and a sum of octet states ${}^1S_0^{(8)}$, ${}^3P_0^{(8)}$, ${}^3P_2^{(8)}$ (yellow dotted line) are shown separately. Green solid line refers to a sum of all these ψ' states contributions. Experimental data is taken from the PHENIX collaboration paper [27]

Таблица 3.3

Результаты фитирования сечения рождения J/ψ в КПМ на данных коллабораций PHENIX ($|y| < 0.35$, $1.2 < |y| < 2.2$) и NA3 ($y > 0$)

Table 3.3

Result of fitting of the prompt J/ψ production within CPM on the PHENIX ($|y| < 0.35$, $1.2 < |y| < 2.2$) and NA3 ($y > 0$) collaborations data

Эксп. данные	PHENIX [27], NA3 [28]
$M_3^{J/\psi}$, ГэВ ³	$(0.0_{-3.3}^{+0.3}) \cdot 10^{-3}$
$\langle \mathcal{O}^{J/\psi} [{}^3S_1^{(8)}] \rangle$, ГэВ ³	$(0.0_{-2.6}^{+1.7}) \cdot 10^{-3}$
$\langle \mathcal{O}^{\chi_{c0}} [{}^3S_1^{(8)}] \rangle$, ГэВ ³	$(4.16 \pm 1.24) \cdot 10^{-3}$
$\chi^2/\text{d.o.f}$	7.23

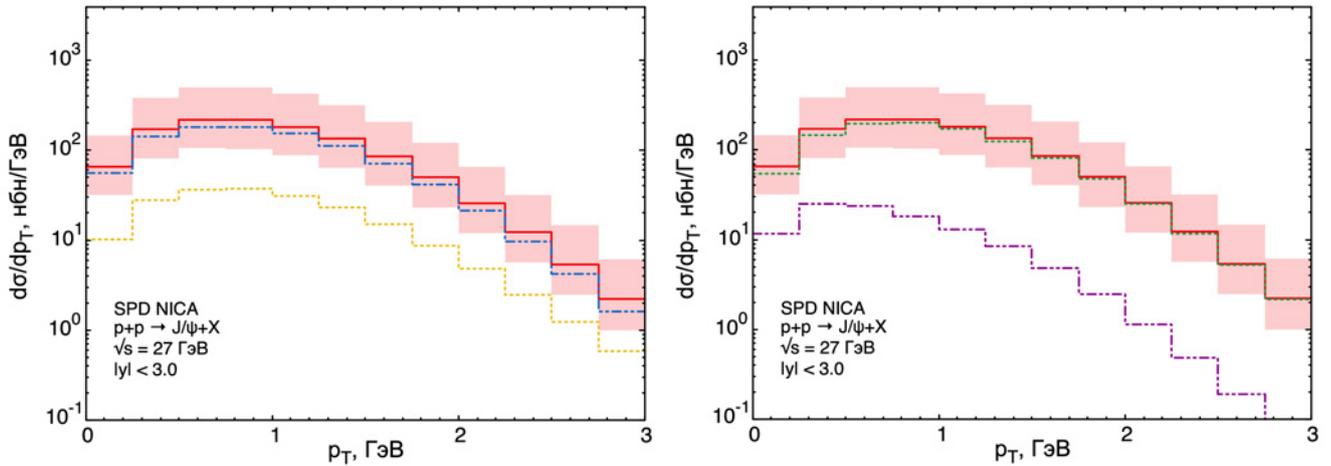


Рис. 3.5. Предсказания зависимости дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса p_T для эксперимента SPD NICA. Слева показано сравнение полных синглетного (синяя пунктирная линия) и октетного (желтая штрихпунктирная с двумя точками) вкладов в рождение J/ψ . Справа — сравнение прямого рождения J/ψ (зеленая пунктирная) и вклада от распадов возбужденных состояний чармония (фиолетовая штрихпунктирная с двумя точками).

Красная сплошная линия в обоих случаях отвечает суммарному сечению J/ψ

Fig. 3.5. Prediction for differential cross section of the prompt J/ψ production as a function of charmonium transverse momentum p_T at NICA energy $\sqrt{s} = 27$ GeV. Comparison of the singlet (yellow dotted line) and octet (blue dash-dot-dotted line) contributions is shown on the left, comparison of the direct J/ψ production (green dotted line) and feed-down (purple dash-dot-dotted line) contributions is shown on the right. Red solid line refers to summed J/ψ production on both plots

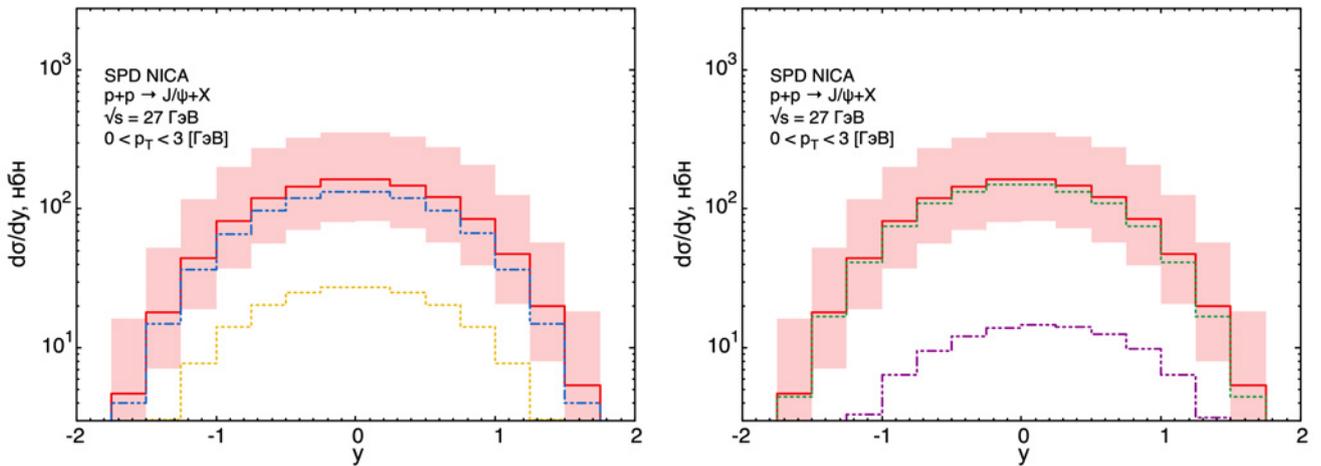


Рис. 3.6. Предсказания зависимости дифференциального сечения рождения J/ψ от быстроты y для эксперимента SPD NICA. Слева показано сравнение полных синглетного (синяя пунктирная линия) и октетного (желтая штрихпунктирная с двумя точками) вкладов в рождение J/ψ . Справа — сравнение прямого рождения J/ψ (зеленая пунктирная) и вклада от распадов возбужденных состояний чармония (фиолетовая штрихпунктирная с двумя точками). Красная сплошная линия в обоих случаях отвечает суммарному сечению J/ψ

Fig. 3.6. Prediction for differential cross section of the prompt J/ψ production as a function of charmonium rapidity y at NICA energy $\sqrt{s} = 27$ GeV. Comparison of the singlet (yellow dotted line) and octet (blue dash-dot-dotted line) contributions is shown on the left, comparison of the direct J/ψ production (green dotted line) and feed-down (purple dash-dot-dotted line) contributions is shown on the right. Red solid line refers to summed J/ψ production on both plots

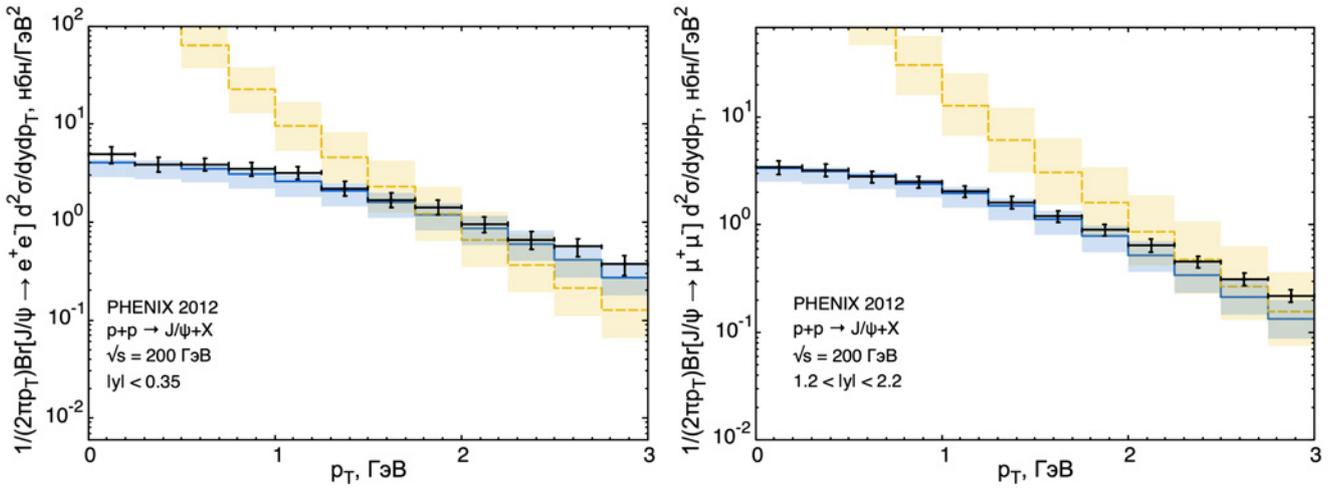


Рис. 3.7. Зависимость дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса чармония p_T . Расчеты в КИМ (желтая штриховая линия) и ОПМ (синяя сплошная). Экспериментальные данные коллаборации PHENIX [27]

Fig. 3.7. Differential cross section of the prompt J/ψ production versus charmonium transverse momentum p_T within CPM (yellow dashed line) and GPM (blue solid line) approaches. Experimental data is taken from the PHENIX collaboration paper [27]

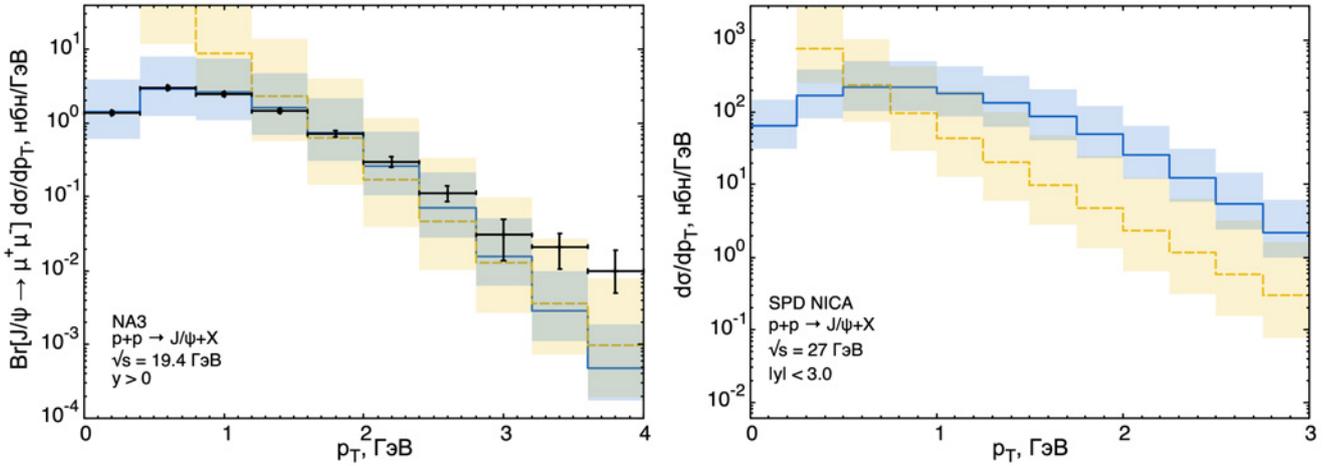


Рис. 3.8. Зависимость дифференциального сечения рождения J/ψ от поперечного импульса чармония p_T . Расчеты в КИМ (желтая штриховая линия) и ОПМ (синяя сплошная) для экспериментальных данных коллаборации NA3 [28] (слева) и предсказаний для SPD NICA (справа)
 Fig. 3.8. Differential cross section of the prompt J/ψ production versus charmonium transverse momentum p_T within CPM (yellow dashed line) and GPM (blue solid line) approaches. Experimental data is taken from the NA3 collaboration paper [28] (on the left). Prediction for differential cross section of J/ψ production at NICA energy (on the right)

гласуются ни с экспериментальными данными, ни с нашими предсказаниями в ОПМ, что, возможно, оправдывает наш подход к описанию неполяризованных J/ψ в ОПМ при $p_T < 3$ ГэВ.

Поляризация в рождении чармония может быть описана через один из коэффициентов в выражении для углового распределения лептонного распада чармония:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim 1 + \lambda \cos^2 \theta + \mu \sin 2\theta \cos \varphi + \nu \sin^2 \theta \cos 2\varphi, \quad \lambda = \frac{\sigma_T - 2\sigma_L}{\sigma_T + 2\sigma_L} = \frac{\sigma - 3\sigma_L}{\sigma + \sigma_L},$$

угловой коэффициент λ выражается через комбинацию сечений продольно и поперечно поляризованных чармониев. Расчеты для данных коллаборации PHENIX по измерению поляризации J/ψ изображены на рис. 3.9, построение границ коридора погрешностей для λ мы осуществляли с помощью следующих

выражений [29]:

$$\lambda_{\theta}^{\text{above}} = \lambda_{\theta}^{\text{centre}} + \sqrt{\left(\lambda_{\theta}^{\mu_F, \text{max}} - \lambda_{\theta}^{\text{centre}}\right)^2 + \left(\lambda_{\theta}^{\mu_R, \text{max}} - \lambda_{\theta}^{\text{centre}}\right)^2},$$

$$\lambda_{\theta}^{\text{below}} = \lambda_{\theta}^{\text{centre}} - \sqrt{\left(\lambda_{\theta}^{\mu_F, \text{min}} - \lambda_{\theta}^{\text{centre}}\right)^2 + \left(\lambda_{\theta}^{\mu_R, \text{min}} - \lambda_{\theta}^{\text{centre}}\right)^2}.$$

Вычисления показывают практически не зависящее от p_T значение коэффициента $\lambda \approx 0.4$, что совершенно не согласуется с имеющимися экспериментальными данными и говорит, вероятно, о том, что НРКХД не подходит для описания рождения поляризованных чармониев, по крайней мере, в лидирующем порядке теории возмущений.

Несмотря на расхождение наших расчетов для поляризации J/ψ с данными PHENIX, мы вычислили λ и для SPD NICA — наши предсказания для зависимости коэффициента λ от p_T и y в рождении J/ψ и ψ' показаны на рис. 3.10.

На рис. 3.11 можно увидеть наши вычисления отношений вкладов P -волновых состояний чармония χ_{cJ} в рождение J/ψ .

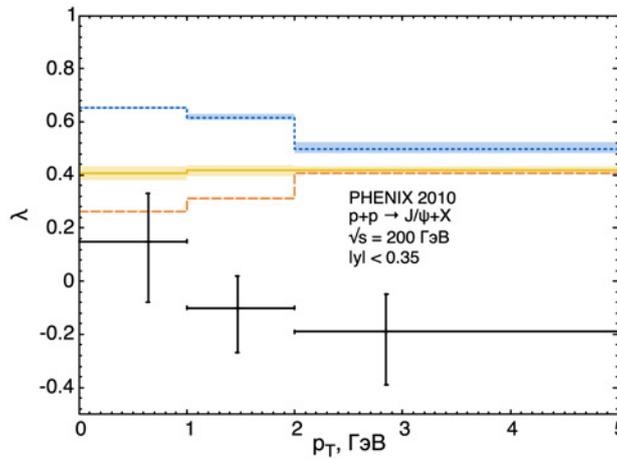


Рис. 3.9. Зависимость поляризации J/ψ от поперечного импульса p_T в ОПМ. Показаны вклад прямого рождения J/ψ (оранжевая штриховая линия), вклад от распада P -волновых состояний чармония χ_{cJ} (синяя пунктирная) и сумма этих вкладов (желтая сплошная). Экспериментальные данные коллаборации PHENIX [4]

Fig. 3.9. Polarization of J/ψ versus charmonium transverse momentum p_T . Direct J/ψ production (orange dashed line), feed-down contribution of P -wave χ_{cJ} states (blue dotted line) and summed J/ψ production (yellow solid line) are shown. Experimental data is taken from the PHENIX collaboration paper [4]

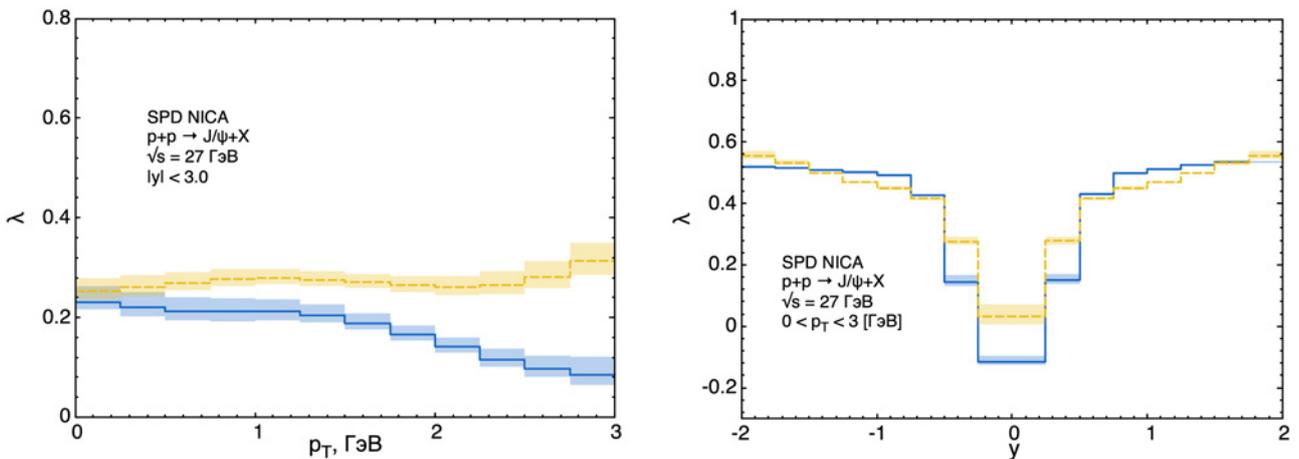


Рис. 3.10. Предсказания зависимости поляризации J/ψ (синяя сплошная линия) и ψ' (желтая штриховая) от поперечного импульса p_T и быстроты y в ОПМ для эксперимента SPD NICA

Fig. 3.10. Prediction for J/ψ (blue solid lines) and ψ' (yellow dashed lines) polarization as functions of charmonium transverse momentum p_T (on the left) and charmonium rapidity y (on the right) at NICA energy

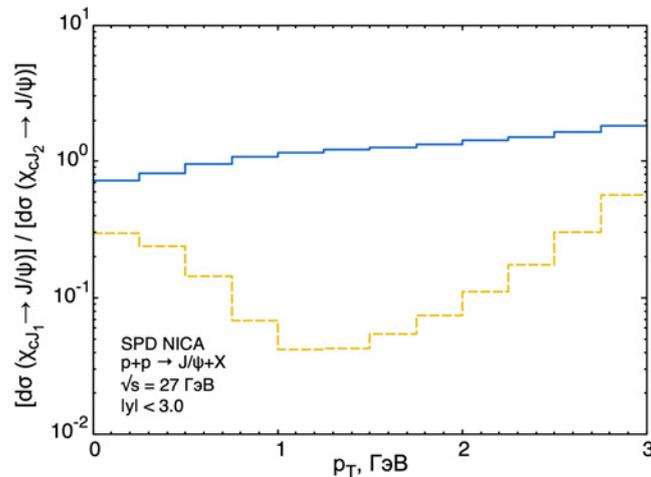


Рис. 3.11. Предсказания для отношений вкладов P -волновых состояний в рождение J/ψ в ОПМ для эксперимента SPD NICA. Показаны отношения сечений для $J_1 = 0 / J_2 = 2$ (синяя сплошная линия) и $J_1 = 1 / J_2 = 2$ (желтая штриховая)

Fig. 3.11. Prediction for ratios of P -wave states contributions to the J/ψ production at NICA energy. Ratios for $J_1 = 0 / J_2 = 2$ (blue solid line) and $J_1 = 1 / J_2 = 2$ (yellow dashed line) are shown

Заключение

Итак, в ходе нашей работы по изучению рождения J/ψ в НРКХД и ОПМ мы провели фитирование ряда экспериментальных данных по рождению J/ψ и ψ' в протон-протонных столкновениях для извлечения из них значений феноменологических параметров, входящих в описание процесса в рамках выбранных нами подходов. С использованием этих параметров мы получили предсказания для рождения неполяризованных и поляризованных J/ψ и ψ' на ускорителе NICA. Исходя из сравнения с предыдущими расчетами в НРКХД и ОПМ и имеющимися экспериментальными данными, можно считать адекватным выбранный нами подход для предсказания рождения неполяризованных чармониев на NICA и недостаточно удовлетворительным для описания поляризации чармониев.

Литература

- [1] Kühn J.H., Kaplan J., Safiani E.G.O. Electromagnetic Annihilation of e^+e^- Into Quarkonium States with Even Charge Conjugation // Nuclear Physics B. 1979. Vol. 157, Issue 1. Pp. 125–144. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90055-5](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90055-5).
- [2] Bodwin G.T., Braaten E., Lepage G.P. Rigorous QCD analysis of inclusive annihilation and production of heavy quarkonium // Physical Review D. 1995. Vol. 51, Issue 3. Pp. 1125–1171. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.55.5853>.
- [3] Fritzsche H. Producing Heavy Quark Flavours in Hadronic Collisions: A Test of Quantum Chromodynamics // Physics Letters B. 1977. Vol. 67, Issue 2. Pp. 217–221. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(77\)90108-3](https://doi.org/10.1016/0370-2693(77)90108-3).
- [4] Adare A. [et al.] Transverse momentum dependence of J/ψ polarization at midrapidity in $p + p$ collisions at $\sqrt{s} = 200$ GeV // Physical Review D. 2010. Vol. 82, Issue 1. P. 012001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.82.012001>.
- [5] Abulencia A. [et al.] Polarizations of J/ψ and $\psi(2S)$ Mesons Produced in $p\bar{p}$ Collisions at $\sqrt{s} = 1.96$ TeV // Physical Review Letters. 2007. Vol. 99, Issue 13. P. 132001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.132001>.
- [6] Brambilla N. [et al.] Heavy Quarkonium: Progress, Puzzles, and Opportunities // The European Physical Journal C. 2011. Vol. 71. Article number 1534. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-010-1534-9>.
- [7] Butenschoen M., Kniehl B.A. Next-to-leading-order tests of NRQCD factorization with J/ψ yield and polarization // Modern Physics Letters A. 2013. Vol. 28, No. 9. P. 1350027. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0217732313500272>.
- [8] Arbuzov A. [et al.] On the physics potential to study the gluon content of proton and deuteron at NICA SPD // Progress in Particle and Nuclear Physics. 2021. Vol. 119. P. 103858. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2021.103858>.

- [9] Karpishkov A.V., Nefedov M.A., Saleev V.A. Spectra and polarizations of prompt J/ψ at the NICA within collinear parton model and parton Regeization approach // Journal of Physics Conference Series. 2020. Vol. 1435, No. 1. P. 012015. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1435/1/012015>.
- [10] Butenschoen M., Kniesl B. A. J/ψ Polarization at the Tevatron and the LHC: Nonrelativistic-QCD Factorization at the Crossroads // Physical Review Letters. 2012. Vol. 108, Issue 17. P. 172002. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.172002>.
- [11] Fadin V.S., Lipatov L.N. Radiative corrections to QCD scattering amplitudes in a multi-Regge kinematics // Nuclear Physics B., 1993. Vol. 406, Issues 1–2. Pp. 259–292. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90168-O](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90168-O).
- [12] Collins J. Foundation of Perturbative QCD. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. 624 p. DOI: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511975592.020>.
- [13] D’Alesio U., Murgia F., Pisano C. Towards a first estimate of the gluon Sivers function from A_N data in pp collisions at RHIC // Journal of High Energy Physics. 2015. Vol. 9. Article number 119. DOI: [https://doi.org/10.1007/JHEP09\(2015\)119](https://doi.org/10.1007/JHEP09(2015)119).
- [14] D’Alesio U., Murgia F., Pisano C., Taels P. Probing the Gluon Sivers Function in $p^\uparrow p \rightarrow J/\psi X$ and $p^\uparrow p \rightarrow DX$ // Physical Review D. 2017. Vol. 96, Issue 3. P. 036011. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.036011>.
- [15] Lepage G.P., Magnea L., Nakhleh C., Magnea U., Hornbostel K. Improved nonrelativistic QCD for heavy-quark physics // Physical Review D. 1992. Vol. 46, Issue 9. Pp. 4052–4067. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.46.4052>.
- [16] Eichten E., Quigg C. Quarkonium wave functions at the origin // Physical Review D. 1995. Vol. 52, Issue 3. P. 1726–1728. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.52.1726>.
- [17] Cho P.L., Leibovich A.K. Color-octet quarkonia production // Physical Review D. 1996. Vol. 53, Issue 1. Pp. 150–162. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.53.150>.
- [18] Beneke M., Krämer M., Vanttinen M. Inelastic photoproduction of polarized J/ψ // Physical Review D. 1998. Vol. 57, Issue 7. Pp. 4258–4274. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.57.4258>.
- [19] Kniesl B.A., Lee J. Polarized J/ψ from χ_{cJ} and ψ' decays at the Fermilab Tevatron // Physical Review D. 2000. Vol. 62, Issue 11. P. 114027. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.114027>.
- [20] Cho P.L., Wise M.B., Trivedi S.P. Gluon fragmentation into polarized charmonium // Physical Review D. 1995. Vol. 51, Issue 5. Pp. R2039–R2043. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.51.R2039>.
- [21] Shtabovenko V., Mertig R., Orellana F. FeynCalc 9.3: New features and improvements // Computer Physics Communications. 2020. Vol. 256. P. 107478. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107478>.
- [22] Hahn T. Generating Feynman diagrams and amplitudes with FeynArts 3 // Computer Physics Communications. 2001. Vol. 140, Issue 3. Pp. 418–431. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0010-4655\(01\)00290-9](https://doi.org/10.1016/s0010-4655(01)00290-9).
- [23] Hanh T. Cuba – a library for multidimensional numerical integration // Computer Physics Communications. 2005. Vol. 168, Issue 2. Pp. 78–95. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.01.010>.
- [24] Martin A.D., Stirling W.J., Thorne R.S., Watt G. Parton distributions for the LHC // The European Physical Journal C. 2009. Vol. 63. Pp. 189–285. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-009-1072-5>.
- [25] Zyla P.A. [et al.] Review of Particle Physics // Progress of Theoretical and Experimental Physics. 2020. Vol. 2020, Issue 8. P. 083C01. DOI: <https://doi.org/10.1093/ptep/ptaa104>.
- [26] Braaten E., Kniesl B.A., Lee J. Polarization of prompt J/ψ at the Tevatron // Physical Review D. 2000. Vol. 62, Issue 9. P. 094005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.094005>.
- [27] Adare A. [et al.] Ground and excited state charmonium production in $p + p$ collisions at $\sqrt{s} = 200$ GeV // Physical Review D. 2012. Vol. 85, Issue 9. P. 092004. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.85.092004>.
- [28] Badier J. [et al.] Experimental J/ψ Hadronic Production from 150-GeV/c to 280-GeV/c // Zeitschrift fur Physik C Particles and Fields. 1983. Vol. 20. Pp. 101–116. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01573213>.
- [29] Nelson R.E., Vogt R., Frawley A.D. Narrowing the uncertainty on the total charm cross section and its effect on the J/ψ cross section // Physical Review C. 2013. Vol. 87, Issue 1. P. 014908. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.014908>.



A.V. Karpishkov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation
E-mail: karpishkoff@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0762-5532>

V.A. Saleev

Samara National Research University, Samara, Russian Federation
E-mail: saleev@samsu.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0505-5564>

K.K. Shilyaev

Samara National Research University, Samara, Russian Federation
E-mail: kirill.k.shilyaev@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-0531-883X>

PROMPT POLARIZED J/ψ PRODUCTION AT NICA WITHIN NRQCD AND GENERALIZED PARTON MODEL

ABSTRACT

In our work we consider prompt J/ψ and ψ' production within the approaches of nonrelativistic quantum chromodynamics and generalized parton model. We use various experimental data ($\sqrt{s} = 200$ GeV and $\sqrt{s} = 19.4$ GeV) of charmonium production to fit octet nonperturbative matrix elements and averaged values of initial partons' transverse momenta. Further, we make evaluation with the extracted parameters and predict J/ψ production cross section and polarization of J/ψ and ψ' at NICA collider energy $\sqrt{s} = 27$ GeV.

Key words: high energy physics; quantum chromodynamics; charmonium; spin; polarization; nonrelativistic quantum chromodynamics; collinear parton model; generalized parton model; SPD NICA.

Citation. Karpishkov A.V., Saleev V.A., Shilyaev K.K. Prompt polarized J/ψ production at NICA within NRQCD and generalized parton model. *Vestnik Samarского университета. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 96–111. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-96-111>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Karpishkov A.V., Saleev V.A., Shilyaev K.K., 2024

Anton V. Karpishkov — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior lecturer of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Vladimir A. Saleev — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Kirill K. Shilyaev — Master's Student of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

References

- [1] Kühn J.H., Kaplan J., Safiani E.G.O. Electromagnetic Annihilation of e^+e^- Into Quarkonium States with Even Charge Conjugation. *Nuclear Physics B*, 1979, vol. 157, issue 1, pp. 125–144. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90055-5](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90055-5).
- [2] Bodwin G.T., Braaten E., Lepage G.P. Rigorous QCD analysis of inclusive annihilation and production of heavy quarkonium. *Physical Review D*, 1995, vol. 51, issue 3, pp. 1125–1171. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.55.5853>.
- [3] Fritzsche H. Producing Heavy Quark Flavours in Hadronic Collisions: A Test of Quantum Chromodynamics. *Physics Letters B*, 1977, vol. 67, issue 2, pp. 217–221. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(77\)90108-3](https://doi.org/10.1016/0370-2693(77)90108-3).
- [4] Adare A. [et al.] Transverse momentum dependence of J/ψ polarization at midrapidity in $p + p$ collisions at $\sqrt{s} = 200$ GeV. *Physical Review D*, 2010, vol. 82, issue 1, p. 012001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.82.012001>.
- [5] Abulencia A. [et al.] Polarizations of J/ψ and $\psi(2S)$ Mesons Produced in $p\bar{p}$ Collisions at $\sqrt{s} = 1.96$ TeV. *Physical Review Letters*, 2007, vol. 99, issue 13, p. 132001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.132001>.
- [6] Brambilla N. [et al.] Heavy quarkonium: Progress, puzzles, and opportunities. *The European Physical Journal C*, 2011, vol. 71, Article number 1534. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-010-1534-9>.
- [7] Butenschoen M., Kniehl B.A. Next-to-leading-order tests of NRQCD factorization with J/ψ yield and polarization. *Modern Physics Letters A*, 2013, vol. 28, no. 9, p. 1350027. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0217732313500272>.

- [8] Arbuzov A. [et al.] On the physics potential to study the gluon content of proton and deuteron at NICA SPD. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 2021, vol. 119, p. 103858. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2021.103858>.
- [9] Karpishkov A.V., Nefedov M.A., Saleev V.A. Spectra and polarizations of prompt J/ψ at the NICA within collinear parton model and parton Reggeization approach. *Journal of Physics Conference Series*, 2020, vol. 1435, no. 1, p. 012015. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1435/1/012015>.
- [10] Butenschoen M., Kniehl B. A. J/ψ Polarization at the Tevatron and the LHC: Nonrelativistic-QCD Factorization at the Crossroads. *Physical Review Letters*, 2012, vol. 108, issue 17, p. 172002. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.172002>.
- [11] Fadin V.S., Lipatov L.N. Radiative corrections to QCD scattering amplitudes in a multi-Regge kinematics. *Nuclear Physics B*, 1993, vol. 406, issues 1–2, pp. 259–292. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90168-O](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90168-O).
- [12] Collins J. *Foundation of Perturbative QCD*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011, 624 p. DOI: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511975592.020>.
- [13] D’Alesio U., Murgia F., Pisano C. Towards a first estimate of the gluon Sivers function from A_N data in pp collisions at RHIC. *Journal of High Energy Physics*, 2015, vol. 9, Article number 119. DOI: [https://doi.org/10.1007/JHEP09\(2015\)119](https://doi.org/10.1007/JHEP09(2015)119).
- [14] D’Alesio U., Murgia F., Pisano C., Taels P. Probing the gluon Sivers function in $p^\uparrow p \rightarrow J/\psi X$ and $p^\uparrow p \rightarrow DX$. *Physical Review D*, 2017, vol. 96, issue 3, p. 036011. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.036011>.
- [15] Lepage G.P., Magnea L., Nakhleh C., Magnea U., Hornbostel K. Improved nonrelativistic QCD for heavy-quark physics. *Physical Review D*, 1992, vol. 46, issue 9, pp. 4052–4067. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.46.4052>.
- [16] Eichten E., Quigg C. Quarkonium wave functions at the origin. *Physical Review D*, 1995, vol. 52, issue 3, pp. 1726–1728. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.52.1726>.
- [17] Cho P.L., Leibovich A.K. Color-octet quarkonia production. *Physical Review D*, 1996, vol. 53, issue 1, pp. 150–162. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.53.150>.
- [18] Beneke M., Krämer M., Vanttinen M. Inelastic photoproduction of polarized J/ψ . *Physical Review D*, 1998, vol. 57, issue 7, pp. 4258–4274. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.57.4258>.
- [19] Kniehl B.A., Lee J. Polarized J/ψ from χ_{cJ} and ψ' decays at the Fermilab Tevatron. *Physical Review D*, 2000, vol. 62, issue 11, p. 114027. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.114027>.
- [20] Cho P.L., Wise M.B., Trivedi S.P. Gluon fragmentation into polarized charmonium. *Physical Review D*, 1995, vol. 51, issue 5, pp. R2039–R2043. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.51.R2039>.
- [21] Shtabovenko V., Mertig R., Orellana F. FeynCalc 9.3: New features and improvements. *Computer Physics Communications*, 2020, vol. 256, p. 107478. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107478>.
- [22] Hahn T. Generating Feynman diagrams and amplitudes with FeynArts 3. *Computer Physics Communications*, 2001, vol. 140, issue 3, pp. 418–431. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0010-4655\(01\)00290-9](https://doi.org/10.1016/s0010-4655(01)00290-9).
- [23] Hanh T. Cuba — a library for multidimensional numerical integration. *Computer Physics Communications*, 2005, vol. 168, issue 2, pp. 78–95. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.01.010>.
- [24] Martin A.D., Stirling W.J., Thorne R.S., Watt G. Parton distributions for the LHC. *The European Physical Journal C*, 2009, vol. 63, pp. 189–285. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-009-1072-5>.
- [25] Zyla P.A. [et al.] Review of Particle Physics. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2020, vol. 2020, issue 8, p. 083C01. DOI: <https://doi.org/10.1093/ptep/ptaa104>.
- [26] Braaten E., Kniehl B.A., Lee J. Polarization of prompt J/ψ at the Tevatron. *Physical Review D*, 2000, vol. 62, issue 9, p. 094005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.094005>.
- [27] Adare A. [et al.] Ground and excited state charmonium production in $p+p$ collisions at $\sqrt{s} = 200$ GeV. *Physical Review D*, 2012, vol. 85, issue 9, p. 092004. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.85.092004>.
- [28] Badier J. [et al.] Experimental J/ψ Hadronic Production from 150-GeV/c to 280-GeV/c. *Zeitschrift für Physik C Particles and Fields*, 1983, vol. 20, pp. 101–116. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01573213>.
- [29] Nelson R.E., Vogt R., Frawley A.D. Narrowing the uncertainty on the total charm cross section and its effect on the J/ψ cross section. *Physical Review C*, 2013, vol. 87, issue 1, p. 014908. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.014908>.



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-112-121

УДК 517.9; 519.7; 530.145.83

Дата: поступления статьи: 22.11.2023
после рецензирования: 28.12.2023
принятия статьи: 28.02.2024

А. Осман

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: ali.oth@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-8811-2521>

Е.К. Башкиров

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация
E-mail: bashkirov.ek@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8682-4956>

ДИНАМИКА АТОМ-АТОМНОГО ПЕРЕПУТЫВАНИЯ В ДВУХАТОМНОЙ МОДЕЛИ С ВЫРОЖДЕННЫМИ ДВУХФОТОННЫМИ ПЕРЕХОДАМИ РАМАНОВСКОГО ТИПА

АННОТАЦИЯ

Найдена точная динамика модели, состоящей из двух двухуровневых атомов, взаимодействующих с модой электромагнитного поля идеального резонатора посредством вырожденных рамановских переходов, для когерентного и теплового состояний поля. Точное решение использовано для расчета атом-атомной отрицательности. Показано, что для сепарабельных начальных состояний атомов их взаимодействие с полем резонатора не приводит к возникновению атом-атомного перепутывания. Найдено, что для белловских начальных состояний атомов в случае когерентного поля резонатора имеет место эффект мгновенной смерти перепутывания для больших средних значений числа фотонов, в то время как для теплового шума указанный эффект отсутствует для любых интенсивностей резонаторного поля.

Ключевые слова: двухуровневые атомы; вырожденные рамановские переходы; резонатор; перепутывание; отрицательность; мгновенная смерть перепутывания.

Цитирование. Осман А., Башкиров Е.К. Динамика атом-атомного перепутывания в двухатомной модели с вырожденными двухфотонными переходами рамановского типа // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 112–121. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-112-121>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Осман А., Башкиров Е.К., 2024

Али Осман — аспирант кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

Евгений Константинович Башкиров — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

1. Предварительные сведения

Перепутывание, заключающееся в наличии нелокальных квантовых корреляций между частями многочастной квантовой системы, является одной из наиболее интересных особенностей квантовой механики, которая тесно связана с ее основами, в частности, с квантовой неразличимостью и нарушением неравенств Белла [1]. Перепутанные состояния в последнее время стали незаменимым ресурсом в квантовой информатике для реализации квантовых вычислений, квантовой связи, квантовой телепортации и др. [1; 2]. Для генерации, управления и контроля перепутанными состояниями естественных и искусственных атомов используют электромагнитные поля резонаторов. Недавние экспериментальные успехи в реализации сильных взаимодействий между фотонами и атомами в высокодобротных резонаторах открывают новые возможности в использовании перепутанных атомных состояний [3–8].

Для описания взаимодействия атомов с выделенными модами электромагнитных полей резонаторов используют модель Джейнса — Каммингса и ее обобщения. Модель Джейнса — Каммингса, как известно, представляет собой простейшую точно решаемую полностью квантовомеханическую модель, состоящую из двухуровневого атома, взаимодействующего с модой идеального резонатора, и позволяющую описать все известные квантовые эффекты взаимодействия излучения с веществом [9]. В последствие было приложено немало усилий для обобщении этой модели [10; 11]. В частности, была изучена динамика многоатомного обобщения модели Джейнса — Каммингса, модель Джейнса — Каммингса с зависящей от интенсивности поля константой атом-полевого взаимодействия, найдены точные решения для трехуровневой модели Джейнса — Каммингса с различными конфигурациями переходов и многие другие (см. ссылки в [10–18]). В случае больших расстройек между частотами переходов и частотами выделенных мод резонатора трехуровневые модели можно свести к эффективным двухуровневым моделям путем аппроксимации, адиабатического исключения либо оценки унитарного преобразования пертурбативно. Полученный таким образом эффективный двухуровневый гамильтониан имеет вид обычного гамильтониана Джейнса — Каммингса, но с заменой одномодовых операторов поля на произведение операторов поля той же моды или произведения операторов мод нескольких выделенных полей с некоторым эффективным параметром связи атом-полевой связи.

Один класс таких систем обсуждался Герри и Эберли [18]. Они рассмотрели трехуровневый атом с конфигурацией переходов Λ -типа, взаимодействующий с двумя выделенными модами полей резонаторов в предположении точного двухфотонного резонанса, как показано на рис. 1. Предполагалось, что уровень 3 находится далеко от резонанса и может быть адиабатически удален, так что этот высоковозбужденный уровень играет роль виртуального переходного состояния. между уровнями 1 и 2. В результате полученная модель состоит из двух невырожденных «основных» состояний, связанных между собой бесфотонным процессом, в котором одновременно поглощается фотон одной моды и испускается фотон другой моды. При этом атом совершает переходы между уровнями 1 и 2 через виртуальное состояние. В этом случае модель можно интерпретировать как резонаторную версию комбинационного рассеяния света, в котором одна мода является полем накачки, а вторая мода соответствует стоксовому полю. Авторы назвали такую модель двухмодовой невырожденной рамановской моделью. После адиабатического устранения третьего уровня эффективный гамильтониан взаимодействия имеет вид гамильтониана обычной модели Джейнса — Каммингса, но с заменой одномодовых полевых операторов произведениями операторов уничтожения фотонов одной моды и рождения фотонов другой моды.

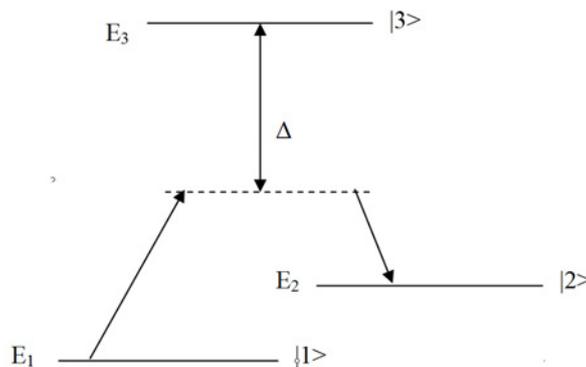


Рис. 1. Схема энергетических уровней и переходов в атоме с невырожденным двухфотонным рамановским взаимодействием

Fig. 1. Scheme of energy levels and transitions in atom with nondegenerate two-photon raman interaction

Двухатомное обобщение невырожденной двухмодовой рамановской модели исследовали Герри и Хуанг [19]. Возможность генерации в такой модели атом-атомного перепутывания, индуцированного тепловыми полями резонаторов, обсуждалась в работе [20]. Квантовая динамика невырожденной двухмодовой рамановской модели с зависящими от интенсивности константами атом-фотонной связи в резонаторе без потерь рассматривалась в [21]. В настоящее время рамановские процессы — стандартный инструмент для охлаждения атомов и манипулирования ими [6]. Вырожденная одномодовая модель с рамановскими переходами обсуждалась впервые в работе [22] в связи с исследованием коллапсов и возрождений осцилляций Раби и сжатия света. В этой модели, как показано на рис. 2, два вырожденных атомных уровня связаны через виртуальный уровень одномодовым переходом рамановского типа.

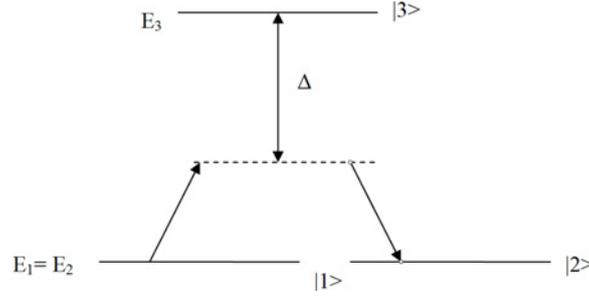


Рис. 2. Схема энергетических уровней и переходов в атоме с вырожденными двухфотонными рамановскими переходами

Fig. 2. Scheme of energy levels and transitions in atom with degenerate two-photon raman interaction

В работах [23; 24] рассмотрено двухатомное обобщение вырожденной одномодовой модели Дженейса — Каммингса с переходами рамановского типа. На основе точного решения уравнения эволюции в работах исследована динамика атом-полевого перепутывания с помощью концепции линейной атомной энтропии. Представляет значительный интерес исследовать динамику атом-атомного перепутывания для указанной модели.

В настоящей статье мы проанализировали динамику атом-атомного перепутывания для двухатомной вырожденной одномодовой модели Дженейса — Каммингса с переходами рамановского типа для произвольного начального состояния атомов и двух начальных состояний поля резонатора: когерентного и теплового. В качестве критерия перепутывания атомов использовалась отрицательность. В результате показано, что перепутывание атомов, индуцированное полем резонатора, не происходит для сепарабельных начальных состояний атомов, а для начальных перепутанных состояний атомов возможен эффект мгновенной смерти и рождения перепутывания.

2. Двухатомная модель с вырожденными двухфотонными переходами рамановского типа

Рассмотрим модель, содержащую два атома, каждый из которых имеет два вырожденных состояния $|+\rangle_i$ и $|-\rangle_i$ ($i = 1, 2$), связанных вырожденными двухфотонными рамановскими переходами с модой поля идеального резонатора. Переход осуществляется через виртуальный уровень [22]. Гамильтониан взаимодействия такой модели в дипольном приближении и приближении вращающейся волны имеет вид

$$H = \hbar g_1 a^+ a (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) + \hbar g_2 a^+ a (\sigma_2^+ + \sigma_2^-). \quad (1)$$

Здесь $\sigma_i^+ = |-\rangle_i \langle +|$ и $\sigma_i^- = |+\rangle_i \langle -|$ — повышающий и понижающий операторы ($i = 1, 2$), $a(a^+)$ — оператор уничтожения (рождения) фотонов резонатора, а g_i — константа связи i -го атома с полем резонатора.

Предположим, что в начальный момент времени атомы находятся в произвольной суперпозиции чистых атомных состояний вида

$$|\Psi(0)\rangle_{A_1 A_2} = C_1(0)|+, +\rangle + C_2(0)|+, -\rangle + C_3(0)|-, +\rangle + C_4(0)|-, -\rangle, \quad (2)$$

где

$$|C_1(0)|^2 + |C_2(0)|^2 + |C_3(0)|^2 + |C_4(0)|^2 = 1.$$

В зависимости от выбора значений коэффициентов $C_i(0)$ мы можем получить различные начальные состояния подсистемы атомов. Если три из четырех коэффициентов $C_i(0)$ равны нулю, а оставшийся

коэффициент равен единице, то мы имеем из (2) начальные некогерентные сепарабельные состояния атомов вида $|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle$. В случае

$$C_1(0) = (\cos \theta_1 |+\rangle + \sin \theta_1 |-\rangle), \quad C_2(0) = \cos \theta_1 \sin \theta_2, \quad C_3(0) = \sin \theta_1 \cos \theta_2, \quad C_4(0) = \sin \theta_1 \sin \theta_2$$

начальное состояние (2) представляет собой сепарабельное когерентное состояние атомов вида

$$|\Psi(0)\rangle_{A_1 A_2} = (\cos \theta_1 |+\rangle_1 + \sin \theta_1 |-\rangle_1) \otimes (\cos \theta_2 |+\rangle_2 + \sin \theta_2 |-\rangle_2),$$

где

$$-\pi \leq \theta_1 \leq \pi, \quad -\pi \leq \theta_2 \leq \pi.$$

Выбирая

$$C_1(0) = 0, \quad C_2(0) = \cos \theta, \quad C_3(0) = \sin \theta, \quad C_4(0) = 0 \quad (-\pi \leq \theta_1 \leq \pi),$$

мы получаем из (2) белловское перепутанное состояние вида

$$|\Psi(0)\rangle_{A_1 A_2} = \cos \theta |+, -\rangle + \sin \theta |-, +\rangle, \quad (3)$$

а для

$$C_1(0) = \cos \theta, \quad C_2(0) = 0, \quad C_3(0) = 0, \quad C_4(0) = \sin \theta$$

мы получаем из (2) другое белловское перепутанное состояние вида

$$|\Psi(0)\rangle_{A_1 A_2} = \cos \theta |+, +\rangle + \sin \theta |-, -\rangle. \quad (4)$$

В качестве начального состояния поля резонатора выберем чистое одномодовое когерентное состояние с волновой функцией

$$|\Psi(0)\rangle_F = \sum_{n=0}^{\infty} F_n |n\rangle, \quad (5)$$

где $F_n = e^{-\bar{n}/2} \bar{n}^{n/2} / \sqrt{n!}$, \bar{n} — среднее число фотонов в когерентном состоянии и $|n\rangle$ — одномодовое фоковское состояние,

либо смешанное одномодовое тепловое состояние с матрицей плотности

$$\rho_F(0) = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|, \quad (6)$$

где вероятности p_n имеют вид

$$p_n = \frac{\bar{n}^n}{(1 + \bar{n})^{n+1}}.$$

В формуле (6) \bar{n} — среднее число фотонов в тепловой моде

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1},$$

где k_B — постоянная Больцмана и T — равновесная температура стенок резонатора.

Для рассматриваемой модели с гамильтонианом взаимодействия (1) можно легко найти явный вид оператора эволюции $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$. В двухатомном базисе $|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle$ оператор эволюции $U(t)$ имеет вид

$$U(t) = \begin{pmatrix} U_{11} & \cdots & \cdots & U_{14} \\ U_{21} & \cdots & \cdots & U_{24} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ U_{41} & \cdots & \cdots & U_{44} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где

$$U_{11} = U_{22} = U_{33} = U_{44} = \cos(\Omega t) \cos(\alpha \Omega t), \quad U_{12} = U_{21} = U_{34} = U_{43} = -i \cos(\Omega t) \sin(\alpha \Omega t), \\ U_{13} = U_{31} = U_{24} = U_{42} = -i \sin(\Omega t) \cos(\alpha \Omega t), \quad U_{14} = U_{41} = U_{23} = U_{32} = -\sin(\Omega t) \sin(\alpha \Omega t)$$

и

$$\Omega = a^+ a, \quad \alpha = g_2/g_1.$$

Для случая $\alpha = 0$ мы имеем дело с одноатомной моделью, а для случая $\alpha = 1$ мы имеем дело с двумя идентичными атомами с одинаковыми константами связи. Ниже для удобства мы будем использовать обозначение $g_1 \equiv g$.

Используя явный вид оператора эволюции (7), мы можем получить временную волновую функцию системы для произвольного состояния атомов (2) и когерентного начального состояния поля резонатора (5) в виде

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle_{A_1 A_2} |\Psi(0)\rangle_F = \sum_n^{\infty} F_n [C_{1n}(t)|+, +\rangle + C_{2n}(t)|+, -\rangle + C_{3n}(t)|-, +\rangle + C_{4n}(t)|-, -\rangle] |n\rangle. \quad (6)$$

Здесь

$$\begin{aligned} C_{1n}(t) &= \left[C_1(0) \cos(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - iC_2(0) \cos(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) - \right. \\ &\quad \left. - iC_3(0) \sin(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - C_4(0) \sin(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) \right], \\ C_{2n}(t) &= \left[-iC_1(0) \cos(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) + C_2(0) \cos(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - \right. \\ &\quad \left. - C_3(0) \sin(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) - iC_4(0) \sin(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) \right], \\ C_{3n}(t) &= \left[-iC_1(0) \sin(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - C_2(0) \sin(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) + \right. \\ &\quad \left. + C_3(0) \cos(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - iC_4(0) \cos(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) \right], \\ C_{4n}(t) &= \left[-C_1(0) \sin(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) - iC_2(0) \sin(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) - \right. \\ &\quad \left. - iC_3(0) \cos(\Omega_n t) \sin(\tilde{\Omega}_n t) + C_4(0) \cos(\Omega_n t) \cos(\tilde{\Omega}_n t) \right], \end{aligned}$$

где $\Omega_n = n$ и $\tilde{\Omega}_n = \alpha n$.

Соответственно, для начального состояния атомов (2) и теплового состояния поля резонатора (6) временная матрица плотности может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \rho(t) &= U(t)\rho(0)U^{-1}(t) = \\ &= \sum_n^{\infty} p_n [C_{1n}(t)|+, +\rangle + C_{2n}(t)|+, -\rangle + C_{3n}(t)|-, +\rangle + C_{4n}(t)|-, -\rangle] \times \\ &\quad \times [C_{1n}^*(t)\langle+, +| + C_{2n}^*(t)\langle+, -| + C_{3n}^*(t)\langle-, +| + C_{4n}^*(t)\langle-, -|]. \end{aligned} \quad (8)$$

3. Расчет отрицательности

В настоящее время существуют два строгих количественных критерия атом-атомного перепутывания: отрицательность (критерий Переса — Хородецких) [25; 26] и согласованность (критерий Вуутерса) [27]. В настоящей работе для анализа динамики перепутывания двух атомов мы будем использовать отрицательность. Для вычисления отрицательности необходимо вычислить редуцированную двухатомную матрицу плотности, которая в двухатомном базисе

$$|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle$$

будет иметь вид

$$\rho_{A_1 A_2}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) & \rho_{13}(t) & \rho_{14}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) & \rho_{23}(t) & \rho_{24}(t) \\ \rho_{31}(t) & \rho_{32}(t) & \rho_{33}(t) & \rho_{34}(t) \\ \rho_{41}(t) & \rho_{42}(t) & \rho_{43}(t) & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где для начального когерентного состояния поля (5) матричные элементы (9) имеют вид

$$\rho_{ij}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} |F_n|^2 C_{in}(t) C_{jn}^*(t) \quad (i, j = 1, 2, 3, 4),$$

а для начального теплового состояния поля (6) соответствующие матричные элементы есть

$$\rho_{ij}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n C_{in}(t) C_{jn}^*(t) \quad (i, j = 1, 2, 3, 4).$$

Для двухатомной системы, описываемой редуцированным атомным оператором плотности $\rho_{A_1 A_2}(t)$, отрицательности можно определить в виде

$$\varepsilon = -2 \sum \mu_i^- \quad (10)$$

где μ_i^- – отрицательные собственные значения частично транспонированной по переменным одного кубита атомной матрицы плотности ($\rho_A^{T_1}$). Если $\varepsilon = 0$, то состояния атомов сепарабельны, если $\varepsilon > 0$, то состояния атомов перепутаны. Значение $\varepsilon = 1$ указывает на максимальную степень перепутывания атомов.

Частично транспонированная по переменным одного кубита атомная матрица плотности для (9) есть

$$\rho_{A_1 A_2}^{T_1}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) & \rho_{13}(t) & \rho_{14}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) & \rho_{23}(t) & \rho_{24}(t) \\ \rho_{31}(t) & \rho_{32}(t) & \rho_{33}(t) & \rho_{34}(t) \\ \rho_{41}(t) & \rho_{42}(t) & \rho_{43}(t) & \rho_{44}(t) \end{pmatrix} \quad (11)$$

Собственные значения матрицы (11) слишком громоздки, поэтому в настоящей работе не приводятся.

4. Результаты и их обсуждение

Результаты численных расчетов отрицательности (11) показывают, что как для сепарабельных некогерентных, так и сепарабельных когерентных начальных состояний атомов перепутывание между ними не возникает в процессе эволюции системы. Аналогичный результат для невырожденной двухатомной модели с рамановскими переходами был ранее получен в статье [20]. Для практических приложений в области квантовой информатики наиболее интересным является исследование динамики атомов, приготовленных в белловских состояниях (3) и (4). При этом для одинаковых значений параметра θ временные зависимости отрицательностей для начальных состояний (3) и (4) совпадают, поэтому в настоящей работе мы остановились на исследовании динамики рассматриваемой модели для начального состояния (3). На рис. 3 представлена временная зависимость отрицательности для начального перепутанного состоя-

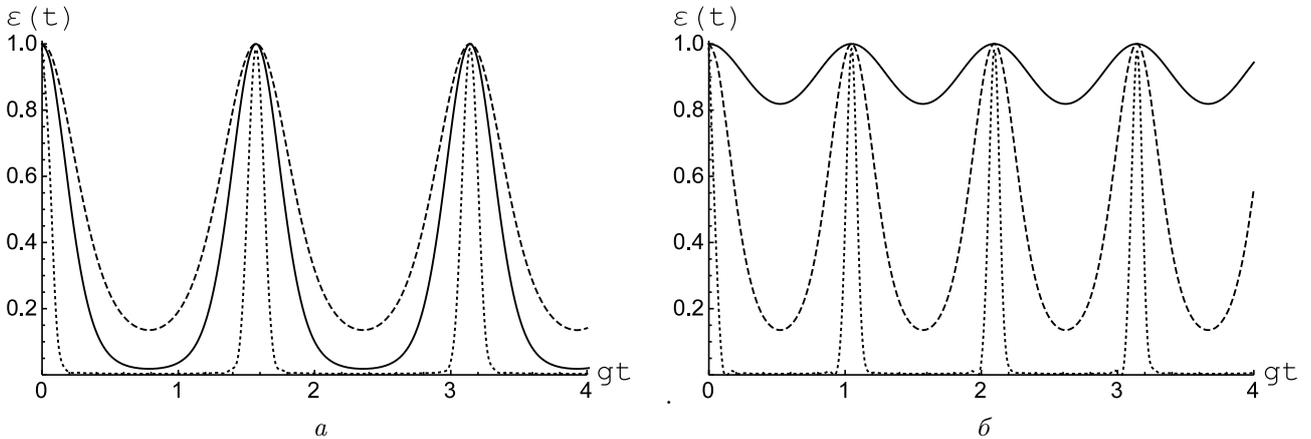


Рис. 3. Отрицательность $\varepsilon(t)$ как функция безразмерного времени gt для белловского начального атомного состояния (3) при $\theta = Pi/4$ для когерентного состояния поля резонатора. Среднее число фотонов $\bar{n} = 0.1$ (сплошная линия), $\bar{n} = 1$ (штриховая линия) и $\bar{n} = 20$ (точечная линия).

Соотношение констант атом-полевого взаимодействия $\alpha = 1$ (а) и $\alpha = 2$ (б)

Fig. 3. Negativity $\varepsilon(t)$ as a function of scaled time gt for Bell type atomic initial state (3) with $\theta = Pi/4$ for coherent state of resonator field. The mean photon number $\bar{n} = 0.1$ (solid), $\bar{n} = 1$ (dashed) and $\bar{n} = 20$ (dotted).

The relation between atom-field couplings $\alpha = 1$ (a) and $\alpha = 2$ (b)

ния атомов (3) и когерентного состояния поля резонатора. Интересной особенностью поведения отрицательности для модели с одинаковыми константами атом-фотонного взаимодействия (рис. 3, а) является отсутствие зависимости амплитуды колебаний параметра перепутывания от среднего числа фотонов в моде. Для любых значений интенсивности поля резонатора отрицательность меняется от максимального значения, равного единице, до практически нулевого значения. Для модели с разными значениями констант атом-полевого взаимодействия (рис. 3, б) амплитуда колебаний отрицательности увеличивается с

ростом интенсивности поля резонатора. Для второй модели в сравнении с первой уменьшается также период осцилляций отрицательности. Отметим также, что для обоих случаев для высоких интенсивностей поля резонатора имеет место эффект мгновенной смерти перепутывания.

На рис. 4 представлена временная зависимость отрицательности для начального перепутанного состояния кубитов (3) и теплового состояния поля резонатора. Для модели с одинаковыми константами атом-фотонного взаимодействия (рис. 3,а) амплитуда колебаний отрицательности слабо зависит от среднего числа фотонов в моде. Однако в отличие от модели с когерентным полем максимальное значение отрицательности существенно уменьшается с увеличением интенсивности теплового поля. Поведение модели с различными константами взаимодействия атомов с полем (рис. 4,б) качественно похоже на поведение модели с одинаковыми значениями констант взаимодействия. Отличие заключается лишь в увеличении периода осцилляций отрицательности для второй из рассматриваемых моделей.

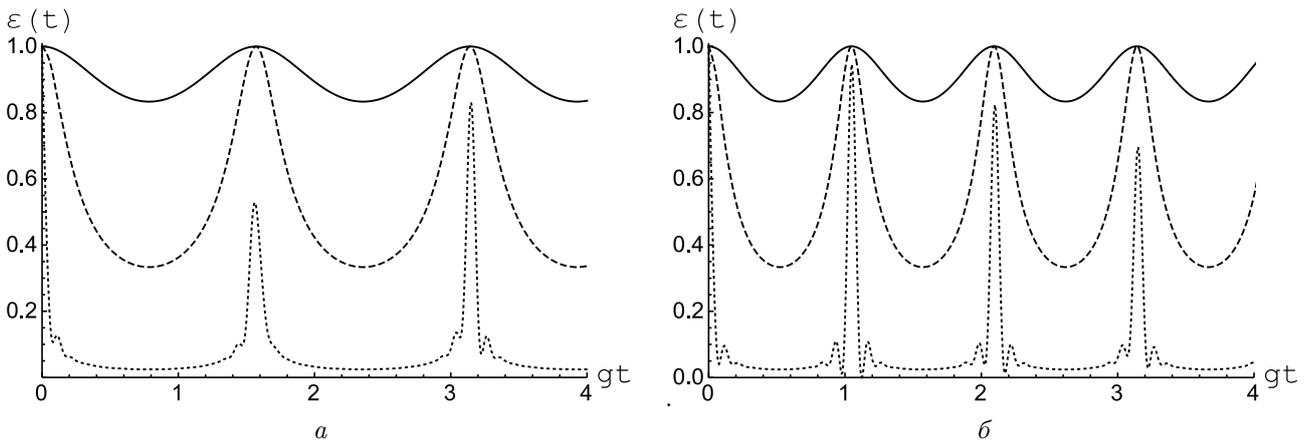


Рис. 4. Отрицательность $\varepsilon(t)$ как функция безразмерного времени gt для белловского начального атомного состояния (3) при $\theta = \pi/4$ для теплового состояния поля резонатора. Среднее число фотонов $\bar{n} = 0.1$ (сплошная линия), $\bar{n} = 1$ (штриховая линия) и $\bar{n} = 20$ (точечная линия).

Соотношение констант атом-полевого взаимодействия $\alpha = 1$ (а) и $\alpha = 2$ (б)

Fig. 4. Negativity $\varepsilon(t)$ as a function of scaled time gt for Bell type atomic initial state (3) with $\theta = \pi/4$ for thermal state of resonator field. The mean photon number $\bar{n} = 0.1$ (solid), $\bar{n} = 1$ (dashed) and $\bar{n} = 20$ (dotted).

The relation between atom-field couplings $\alpha = 1$ (a) and $\alpha = 2$ (b)

Наиболее интересной особенностью поведения отрицательности для теплового поля резонатора является отсутствие эффекта мгновенной смерти перепутывания атомов в процессе их эволюции для любых интенсивностей теплового поля резонатора. Полученные результаты могут быть использованы в области физики квантовых вычислений при выборе наиболее эффективных механизмов управления и контроля перепутанными состояниями атомов.

Заключение

Таким образом, в настоящей статье мы рассмотрели динамику атом-атомного перепутывания двух неидентичных двухуровневых атомов, взаимодействующих с когерентным или тепловым электромагнитным полем идеального резонатора посредством вырожденных переходов рамановского типа. Нами найдено точное решение рассматриваемой модели для любых начальных состояний атомов. На основе точного решения проведен расчет критерия перепутывания атомов – отрицательности. Показано, что для сепарабельных начальных состояний атомов перепутывания атомов за счет взаимодействия с полем резонатора не происходит. Наиболее интересным в поведении критерия перепутывания атомов для их белловских начальных перепутанных состояний является отсутствие эффекта мгновенной смерти перепутывания атомов для теплового поля резонатора и его наличие для когерентного состояния в случае высоких интенсивностей поля резонатора.

Литература

- [1] Gu X., Kockum A.F., Miranowicz A., Liu Y.X., Nori F. Microwave photonics with superconducting quantum circuits // Physics Reports. 2017. Vol. 718–719. Pp. 1–102. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2017.10.002>.

- [2] Xiang Z.-L., Ashhab S., You J.Q., Nori F. Hybrid quantum circuits: Superconducting circuits interacting with other quantum systems // Review of Modern Physics. 2013. Vol. 85, Issue 2. Pp. 623–653. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.85.623>.
- [3] Kjaergaard M., Schwartz M.E., J. Braumuller J., Krantz P., Wang J.-I., Gustavsson S., Oliver W.D. Superconducting Qubits: Current State of Play // Annual Review of Condensed Matter Physics. 2020. Vol. 11, Issue 1. Pp. 369–395. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050605>.
- [4] Souza A.M., Sarthour R.S., Oliveira I.S. Entanglement in many body systems // Physica B: Condensed Matter. 2023. Vol. 653. P. 414511. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.414511>.
- [5] Cole Daniel C., Erickson S.D., Wu J., Hou P., Wilson A., Leibfried D., Reiter F. Dissipative preparation of W states in trapped ion systems. // New Journal of Physics. 2021. Vol. 23. P. 073001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ac09c8>.
- [6] Raimond J.M., Brune M., Haroche S. Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity // Reviews of Modern Physics. 2001. Vol. 73, Issue 3. Pp. 565–582. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.565>.
- [7] Buluta I., Ashhab S., Nori F. Natural and artificial atoms for quantum computation // Reports of Progress in Physics. 2011. Vol. 74, Number 10. P. 104401. DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/74/10/104401>.
- [8] Georgescu I.M., Ashhab S., Nori F. Quantum simulation // Reviews of Modern Physics. 2014. Vol. 88, Issue 1. Pp. 153–185. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.153>.
- [9] Jaynes E.T., Cummings F.W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser // Proceedings of the IEEE. 1963. Vol. 51, Issue 1. Pp. 89–109. DOI: <https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664>.
- [10] Yoo H.Y., Eberly J.H. Dynamical theory of an atom with two and three levels interacting with quantized cavity fields // Physics Reports. 1985. Vol. 118, Issue 5. Pp. 239–337. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(85\)90015-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(85)90015-8).
- [11] Shore B.W., Knight P.L. The Jaynes-Cummings model // Journal of Modern Optics. 1995. Vol. 40, Issue 7. Pp. 1195–1238. DOI: <https://doi.org/10.1080/09500349314551321>.
- [12] Faraji E., Tavassoly M.K., Baghshahi H.R. Entanglement Evolution Between Various Subsystems of Two Three-level Atoms Interacting with a Two-mode Quantized Field in the Presence of Converter Terms // International Journal of Theoretical Physics. 2016. Vol. 55. Pp. 2573–2587. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10773-015-2892-8>.
- [13] Pakniat R., Tavassoly M.K., Zandi M.H. Dynamics of Information Entropies of Atom-Field Entangled States Generated via the Jaynes-Cummings Model // Communications in Theoretical Physics. 2016. Vol. 65, Number 3. Pp. 266–272. DOI: <https://doi.org/10.1088/0253-6102/65/3/266>.
- [14] Alexanian M., Bose S.K. Unitary transformation and the dynamics of a three-level atom interacting with two quantized field modes // Physical Review A. 1995. Vol. 52, Issue 3. Pp. 2218–2224. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.2218>.
- [15] Wu Y. Effective Raman theory for a three-level atom in the Λ configuration // Physical Review A. 1996. Vol. 54, Issue 2. Pp. 1586–1592. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.1586>.
- [16] Wu Y., Yang X.X. Effective two-level model for a three-level atom in the Ξ configuration // Physical Review A. 1997. Vol. 56, Issue 3. Pp. 2443–2446. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.2443>.
- [17] Bashkirov E.K. Dynamics of the Two-Atom Jaynes-Cummings Model with Nondegenerate Two-Photon Transitions // Laser Physics. 2006. Vol. 16. Pp. 1218–1226. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1054660X0608010X>.
- [18] Gerry C.C., Eberly J.H. Dynamics of a Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields // Physical Review A. 1990. Vol. 42, Issue 11. Pp. 6805–6815. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.42.6805>.
- [19] Gerry C.C., Huang H. Dynamics of a two-atom Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields // Physical Review A. 1992. Vol. 45, Issue 11. Pp. 8037–8044. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.45.8037>.
- [20] Bashkirov E.K. Entanglement induced by the two-mode thermal noise // Laser Physics Letters. 2006. Vol. 3, Issue 3. Pp. 145–150. DOI: <https://doi.org/10.1002/lapl.200510081>. EDN: <https://elibrary.ru/ljnxsz>.
- [21] Singh S., Gilhare K. Dynamics for a Two-Atom Two-Mode Intensity-Dependent Raman Coupled Model // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2016. Vol. 122. Pp. 984–994. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063776116050216>.
- [22] Gerry C.C. Degenerate Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields // Physics Letters A. 1991. Vol. 161, Issue 1. Pp. 9–12. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(91\)90535-g](https://doi.org/10.1016/0375-9601(91)90535-g).
- [23] Song T.-Q., Feng J., Wang M.-Z., Xu J.-Z. Effects of the relative coupling constants on the dynamic properties of a two-atom system // Physical Review A. 1995. Vol. 51, Issue 3. Pp. 2648–2650. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.2648>.

- [24] Башкиров Е.К., Сочкова Е.Ю. Перепутывание в двухатомной модели с вырожденными рамановскими переходами // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер.: Физико-математические науки. 2011. Вып. 2(23). С. 135–141. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu934>.
- [25] Peres A. Separability Criterion for Density Matrices // Physical Review Letters. 1996. Vol. 77, Issue 8. Pp. 1413–1415. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.1413>.
- [26] Horodecki R., Horodecki M., Horodecki P. Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Condition // Physics Letters A. 1996. Vol. 223, Issues 1–2. Pp. 333–339. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)00706-2](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00706-2).
- [27] Wootters W.K. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits // Physical Review Letters. 1998. Vol. 80, Issue 10. Pp. 2245–2248. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.2245>.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-112-121

Submitted: 22.11.2023

Revised: 28.12.2023

Accepted: 28.02.2024

A. Othman

Samara National Research University, Samara, Russian Federation
E-mail: oth@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-8811-2521>

E.K. Bashkirov

Samara National Research University, Samara, Russian Federation
E-mail: bashkirov.ek@ssau.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8682-4956>

DYNAMICS OF ATOM-ATOM ENTANGLEMENT IN TWO-ATOM MODEL WITH DEGENERATE TWO-PHOTON RAMAN TRANSITIONS

ABSTRACT

The exact dynamics of a model consisting of two two-level atoms interacting with the electromagnetic field mode of an ideal resonator through degenerate Raman transitions are found for coherent and thermal field states. The exact solution is used to calculate atom-atom negativity. It is shown that for separable initial states of atoms, their interaction with the resonator field does not lead to the occurrence of atom-atom entanglement. It was found that for the Bell initial states of atoms in the case of a coherent resonator field, the effect of sudden death of entanglement takes place for large average values of the number of photons in the resonator, while in case of thermal noise, this effect is absent for any intensities of the resonator field.

Key words: two-level atoms; degenerate raman transitions; cavity; entanglement; negativity; sudden death of entanglement.

Citation. Othman A., Bashkirov E.K. Dynamics of atom-atom entanglement in two-atom model with degenerate two-photon raman transitions. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 112–121. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-112-121>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Othman A., Bashkirov E.K., 2024

Ali Othman — graduate student of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Eugene K. Bashkirov — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor of the Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

References

- [1] Gu X., Kockum A.F., Miranowicz A., Liu Y.X., Nori F. Microwave photonics with superconducting quantum circuits. *Physics Reports*, 2017, vol. 718–719, pp. 1–102. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2017.10.002>.
- [2] Xiang Z.-L., Ashhab S., You J.Q., Nori F. Hybrid quantum circuits: Superconducting circuits interacting with other quantum systems. *Review of Modern Physics*, 2013, vol. 85, issue 2, pp. 623–653. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.85.623>.

- [3] Kjaergaard M., Schwartz M.E., J. Braumuller J., Krantz P., Wang J.-I., Gustavsson S., Oliver W.D. Superconducting Qubits: Current State of Play. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2020, vol. 11, issue 1, pp. 369–395. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050605>.
- [4] Souza A.M., Sarthour R.S., Oliveira I.S. Entanglement in many body systems. *Physica B: Condensed Matter*, 2023, vol. 653, p. 414511. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.414511>.
- [5] Cole Daniel C., Erickson S.D., Wu J., Hou P., Wilson A., Leibfried D., Reiter F. Dissipative preparation of W states in trapped ion systems. *New Journal of Physics*, 2021, vol. 23, p. 073001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ac09c8>.
- [6] Raimond J.M., Brune M., Haroche S. Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity. *Review of Modern Physics*, 2001, vol. 73, issue 3, pp. 565–582. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.565>.
- [7] Buluta I., Ashhab S., Nori F. Natural and artificial atoms for quantum computation. *Reports on Progress in Physics*, 2011, volume 74, number 10, p. 104401. DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/74/10/104401>.
- [8] Georgescu I.M., Ashhab S., Nori F. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, 2014, vol. 88, issue 1, pp. 153–185. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.153>.
- [9] Jaynes E.T., Cummings F.W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, 1963, vol. 51, pp. 89–109. DOI: <https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664>.
- [10] Yoo H.Y., Eberly J.H. Dynamical theory of an atom with two and three levels interacting with quantized cavity fields. *Physics Reports*, 1985, vol. 118, issue 5, pp. 239–337. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(85\)90015-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(85)90015-8).
- [11] Shore B.W., Knight P.L. The Jaynes-Cummings model. *Journal of Modern Optics*, 1995, vol. 40, issue 7, pp. 1195–1238. DOI: <https://doi.org/10.1080/09500349314551321>.
- [12] Faraji E., Tavassoly M.K., Baghshahi H.R. Entanglement Evolution Between Various Subsystems of Two Three-level Atoms Interacting with a Two-mode Quantized Field in the Presence of Converter Terms. *International Journal of Theoretical Physics*, 2016, vol. 55, pp. 2573–2587. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10773-015-2892-8>.
- [13] Pakniat R., Tavassoly M.K., Zandi M.H. Dynamics of Information Entropies of Atom-Field Entangled States Generated via the Jaynes-Cummings Model. *Communications in Theoretical Physics*, 2016, vol. 65, number 3, pp. 266–272. DOI: <https://doi.org/10.1088/0253-6102/65/3/266>.
- [14] Alexanian M., Bose S.K. Unitary transformation and the dynamics of a three-level atom interacting with two quantized field modes. *Physical Review A*, 1995, vol. 52, pp. 2218–2224. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.2218>.
- [15] Wu Y. Effective Raman theory for a three-level atom in the Λ configuration. *Physical Review A*, 1996, vol. 54, issue 2, pp. 1586–1592. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.1586>.
- [16] Wu Y., Yang X.X. Effective two-level model for a three-level atom in the Ξ configuration. *Physical Review A*, 1997, vol. 56, pp. 2443–2446. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.2443>.
- [17] Bashkirov E.K. Dynamics of the Two-Atom Jaynes-Cummings Model with Nondegenerate Two-Photon Transitions. *Laser Physics*, 2006, vol. 16, pp. 1218–1226. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1054660X0608010X>.
- [18] Gerry C.C., Eberly J.H. Dynamics of a Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields. *Physical Review A*, 1990, vol. 42, issue 11, pp. 6805–6815. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.42.6805>.
- [19] Gerry C.C., Huang H. Dynamics of a two-atom Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields. *Physical Review A*, 1992, vol. 45, issue 11, pp. 8037–8044. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.45.8037>.
- [20] Bashkirov E.K. Entanglement induced by the two-mode thermal noise. *Laser Physics Letters*, 2006, vol. 3, issue 3, pp. 145–150. DOI: <https://doi.org/10.1002/lapl.200510081>.
- [21] Singh S., Gilhare K. Dynamics for a Two-Atom Two-Mode Intensity-Dependent Raman Coupled Model. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2016, vol. 122, pp. 984–994. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063776116050216>.
- [22] Gerry C.C. Degenerate Raman coupled model interacting with two quantized cavity fields. *Physics Letters A*, 1991, vol. 161, issue 1, pp. 9–12. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(91\)90535-g](https://doi.org/10.1016/0375-9601(91)90535-g).
- [23] Song T.-Q., Feng J., Wang M.-Z., Xu J.-Z. Effects of the relative coupling constants on the dynamic properties of a two-atom system. *Physical Review A*, 1995, vol. 51, issue 3, pp. 2648–2650. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.2648>.
- [24] Bashkirov E.K., Sochkova E.Yu. Entanglement in two-atom model with degenerate Raman transitions. *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, 2011, issue 2 (23), pp. 135–141. DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu934>. (In Russ.)
- [25] Peres A. Separability Criterion for Density Matrices. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, issue 8, pp. 1413–1415. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.1413>.
- [26] Horodecki R., Horodecki M., Horodecki P. Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Condition. *Physics Letters A*, 1996, vol. 223, issues 1–2, pp. 333–339. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)00706-2](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00706-2).
- [27] Wootters W.K. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Physical Review Letters*, 1998, vol. 80, issue 10, pp. 2245–2248. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.2245>.



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-122-131

УДК 579.017:57.033

Дата: поступления статьи: 15.01.2024
после рецензирования: 20.02.2024
принятия статьи: 28.02.2024

Д.Н. Чернышёв

Севастопольский государственный университет,
г. Севастополь, Российская Федерация

E-mail: chernishev@gmail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8120-7382>

В.С. Клочкова

Севастопольский государственный университет,
г. Севастополь, Российская Федерация

E-mail: viki-iki@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2120-9589>

А.С. Лелеков

ФГБУН ФИЦ "Институт биологии южных морей имени А.О. Ковалевского РАН",
г. Севастополь, Российская Федерация

E-mail: a.lelekov@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1213-7963>

МОДЕЛЬ ДЕКОМПОЗИЦИИ НАТИВНОГО СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ КУЛЬТУРЫ *PORPHYRIDIUM PURPUREUM*

АННОТАЦИЯ

В статье разработана модель нативного спектра поглощения культуры красной морской водоросли *Porphyridium purpureum*. Математическая модель каждого пигмента представляет сумму кривых Гаусса. Для нивелирования светорассеяния спектры культуры фиксировались на спектрофотометре с интегрирующей сферой. Для верификации модели проводилась серия параллельных измерений концентрации фотосинтетических пигментов стандартными биохимическими методиками и методом кривых Гаусса. Показано, что предлагаемая модель с достаточной точностью позволяет определить концентрацию основных фотосинтетических пигментов культуры *Porphyridium purpureum*, не вмешиваясь в процессы ее роста.

Ключевые слова: математическая модель; В-фикоэритрин; хлорофилл *a*; суммарные каротиноиды; кривые Гаусса; истинный спектр поглощения.

Цитирование. Чернышёв Д.Н., Клочкова В.С., Лелеков А.С. Модель декомпозиции нативного спектра поглощения культуры *Porphyridium purpureum* // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 122–131. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-122-131>.

Информация о конфликте интересов: авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Чернышёв Д.Н., Клочкова В.С., Лелеков А.С., 2024

Дмитрий Николаевич Чернышёв — заведующий лабораторией кафедры физики, Севастопольский государственный университет, 299053, Российская Федерация, г. Севастополь, ул. Университетская, 33.
Виктория Сергеевна Клочкова — инженер кафедры физики, Севастопольский государственный университет, 299053, Российская Федерация, г. Севастополь, ул. Университетская, 33.

Александр Сергеевич Лелеков — кандидат биологических наук, старший научный сотрудник, отдел биотехнологий и фиторесурсов, ФГБУН ФИЦ "Институт биологии южных морей имени А.О. Ковалевского РАН", 299011, Российская Федерация, г. Севастополь, пр. Нахимова, 2.

Введение

Водоросли рода *Porphyridium* известны тем, что продуцируют фикобилипротеины, полиненасыщенные жирные кислоты и экзополисахариды [1]. Фикобилипротеины – это группа окрашенных, водорастворимых белков, составляющих основной комплекс светособирающих пигментов цианобактерий, красных водорослей, глаукоцистофитов и криптофитов. Фикоэритрин является основным пигментом красных морских водорослей, составляющим 60–80 % от общего количества растворимых белков [2]. Также пигменты представлены хлорофиллом *a* и каротиноидами (преимущественно бета-каротин и зеоксантин). Хлорофилл *a* – основной фотосинтетический пигмент микроводорослей, а такие каротиноиды, как бета-каротин и зеоксантин, являются фотопротекторными пигментами и передают энергию на хлорофилл при фотосинтезе [3].

Количественное содержание пигментов в культуре микроводорослей представляет ценную информацию о физиологическом состоянии, однако их определение достаточно сложная и трудоемкая задача [4]. Среди множества доступных современных методов наиболее используемыми являются микроволновая экстракция, ультразвуковая экстракция, гомогенизация под высоким давлением, экстракция сверхкритическими жидкостями и ускоренная экстракция растворителем (также называемая экстракцией жидкостью / растворителем под давлением или субкритической экстракцией растворителем) [5; 6]. При работе с интенсивными культурами микроводорослей достаточно часто возникает необходимость определения пигментов, не прибегая к экстракции и не вмешиваясь в процессы роста культуры. Определение пигментов *in vivo* – это быстрый метод без разрушения клеток. Одним из способов вычисления концентрации пигментов в нативном состоянии является анализ спектров поглощения культуры микроводорослей с помощью математического моделирования [7].

Таким образом, целью данной статьи является разработка математической модели спектра поглощения культуры *Porphyridium purpureum*, которая позволяла бы определять концентрации основных фотосинтетических пигментов: хлорофилла *a*, В-фикоэритрина и суммарных каротиноидов.

1. Материалы и методы исследования

Экспериментальные работы выполняли на базе кафедры "Физика" СевГУ. В работе использовалась красная морская водоросль *Porphyridium purpureum* (Bory) Drew et Ross (Rhodophyta). Культуру *P. purpureum* выращивали в накопительном режиме, используя среду для красных морских водорослей [8], в плоскопараллельном фотобиореакторе объемом 1,2 л, рабочая толщина культуры – 2 см [9]. Нижняя грань фотобиореактора расположена под углом с целью улучшения перемешивания суспензий микроводорослей и цианобактерий. Сверху культиватор закрывался пластиковой крышкой, в которой было выполнено отверстие для подачи воздуха, а также был оснащен системой охлаждения ("водяной рубашкой"), обеспечивающей поддержание температуры.

В качестве источника освещения использовали горизонтальную световую решетку из светодиодных ламп LCD Feron LB-213 мощностью 10 Вт. В эксперименте освещенность составляла 5 клк или 17 Вт·м⁻². Температуру стабилизировали на уровне 25 ± 1 °С. Барботаж культуры осуществляли аквариумным компрессором Hailea АСО-308 воздухом через аквариумный распылитель, представляющий собой пластиковую трубку длиной 5 см, диаметром 5 мм, у которой диаметр пор не превышает 0,1 мм. Скорость подачи воздуха составляла 1 л·л⁻¹ культуры в минуту. Дополнительного введения углекислого газа не производилось.

Отбор проб для определения оптической плотности проводили из разных точек внутри фотобиореактора: отбирали по 5 мл суспензии клеток водорослей, получая таким образом "среднюю пробу" объемом 30 мл. В средней пробе после перемешивания определяли коэффициент пропускания. Оптическую плотность рассчитывали по формуле: $D = -\lg(T)$, где T – величина пропускания, определяемая на фотометре КФК-2 при длине волны 750 нм, погрешность измерения величины пропускания не превышала 1 %. Кюветы располагали максимально близко к фотоприемнику, что позволяло снизить ошибку измерения оптической плотности культуры, связанную со светорассеянием. Пробы с оптической плотностью выше единицы предварительно разбавляли свежей питательной средой, подбирая коэффициент разбавления таким образом, чтобы показания КФК-2 попадали в диапазон наименьшей погрешности (0,2 – 0,6 единиц).

Для определения сухого веса 5–10 мл суспензии центрифугировали в течение 10 минут при 3000 об·мин⁻¹, сливали надосадочную жидкость, осадок промывали дистиллированной водой, повторно центрифугировали и сушили в течение суток при 55 °С. В результате получена линейная зависимость сухого веса от оптической плотности D_{750} , а коэффициент пропорциональности составил $k = 0,7$ г СВ·л⁻¹·ед. опт. пл⁻¹.

Пробы для определения содержания пигментов отбирали ежедневно на различных фазах роста накопительной культуры после тщательного перемешивания. Концентрации хлорофилла *a*, В-фикоэритрина и суммарных каротиноидов (далее — хл *a*, В-ФЭ, кр) определяли согласно стандартным методикам [10–12]. После отбора проб из фотобиореактора проводили центрифугирование при 3000 об·мин⁻¹, надосадочную жидкость сливали. Далее проводили несколько циклов "замораживание-оттаивание" в морозильной камере при -18 °С. Затем В-ФЭ экстрагировали водным буферным раствором с рН 7–7,5. После изменения цвета осадка (из красного на зеленый), с помощью ацетона выделяли хл *a*. Спектры экстрактов пигментов записывали на спектрофотометре Unicо в кварцевых 1 см кюветах в диапазоне длин волн 400 — 800 нм с шагом 0,5 нм. Регистрировали оптическую плотность полученных экстрактов в области характеристических максимумов поглощения В-ФЭ (545 нм), R-фикоцианина (615 нм), аллофикоцианина (650 нм), хл *a* (663 нм) и кр (480 нм). Концентрацию В-ФЭ определяли по [10], хл *a* [11], кр [12] с учетом объемов экстрактов и массы навесок:

$$C_{BPE} = \frac{D_{650}}{\varepsilon_{APC}} + \frac{D_{615}}{\varepsilon_{RPC}} + \frac{D_{545}}{\varepsilon_{BPE}}, \quad (1)$$

$$C_{chla} = \frac{D_{663}}{\varepsilon_{chla}}, \quad (2)$$

$$C_{car} = \frac{D_{480}}{\varepsilon_{car}}, \quad (3)$$

где D_{650} , D_{615} , D_{545} , D_{680} , D_{480} — значения оптических плотностей в соответствующей длине волны; ε_{BPE} — экстинкция В-фикоэритрина 10 (л·г⁻¹·см⁻¹); ε_{RPC} — экстинкция R-фикоцианина 7 (л·г⁻¹·см⁻¹); ε_{APC} — экстинкция аллофикоцианина 5,8 (л·г⁻¹·см⁻¹); ε_{chla} — экстинкция хлорофилла *a* 88,15 (л·г⁻¹·см⁻¹); ε_{car} — экстинкция суммарных каротиноидов 2500 (л·г⁻¹·см⁻¹).

Спектры поглощения культуры регистрировались в диапазоне от 400 до 800 нм с шагом 0,5 нм на двухлучевом спектрофотометре Lambda 365 Double Beam UV-Visible (производитель: Perkin Elmer, Индия), который оснащен интегрирующей сферой (ИС) диаметром 60 мм (внешнее покрытие — BaSO₄). Для определения концентрации пигментов методом кривых Гаусса необходим истинный спектр поглощения, компенсированный на рассеяние, который определяли по формуле [13]:

$$\tilde{A} = D(\lambda; r) - L(r; 0) \cdot [D(\lambda; r) - D(\lambda; 0)], \quad (4)$$

где $D(\lambda; r)$ — оптическая плотность образца, расположенного на некотором расстоянии r от ИС; $L(r; 0)$ — поправочный коэффициент ослабления света; $D(\lambda; 0)$ — оптическая плотность образца при стандартном положении кюветы.

2. Результаты и их обсуждение

Экспериментальные результаты

На рис. 1, *A* представлена накопительная кривая роста культуры *P. purpureum*, которая характеризуется наличием ярко выраженных экспоненциальной и линейной фаз роста.

Биомасса культуры за две недели эксперимента увеличилась почти в 50 раз и достигла 1,7 г СВ·л⁻¹, что с учетом толщины фотобиореактора (1 см) составляет 17 г СВ·м⁻². Экспоненциальная и линейная фазы роста культуры описывались выражениями:

$$B = B_0 \cdot e^{\mu_m \cdot t}, \quad B = B_l + P_m \cdot (t - t_l), \quad (5)$$

где B_0 — начальная плотность культуры, г СВ·л⁻¹; μ_m — максимальная удельная скорость роста, которая составила 0,7 сут⁻¹; B_l — плотность культуры на момент начала линейного роста t_l ; P_m — максимальная продуктивность, значение которой составило 0,21 г СВ·л⁻¹·сут⁻¹.

Проведенные расчеты позволяют предположить, что рост порфиридиума начиная с третьих суток эксперимента был ограничен потоком углекислого газа. В работе [14] показано, что максимальная продуктивность культуры *P. purpureum* достигала 0,42 г СВ·л⁻¹·сут⁻¹ при такой же освещенности и рабочем слое культуры.

На рис. 1, *B* представлена динамика истинных спектров поглощения, компенсированных на рассеяние, определенные по формуле (4). Получим математическую модель, позволяющую описать такие данные и определить концентрации основных фотосинтетических пигментов.

Модель спектра поглощения

При анализе нормированного в точке максимума (678 нм) спектра поглощения культуры *P. purpureum*, для достоверного выявления пиков была вычислена производная второго порядка.

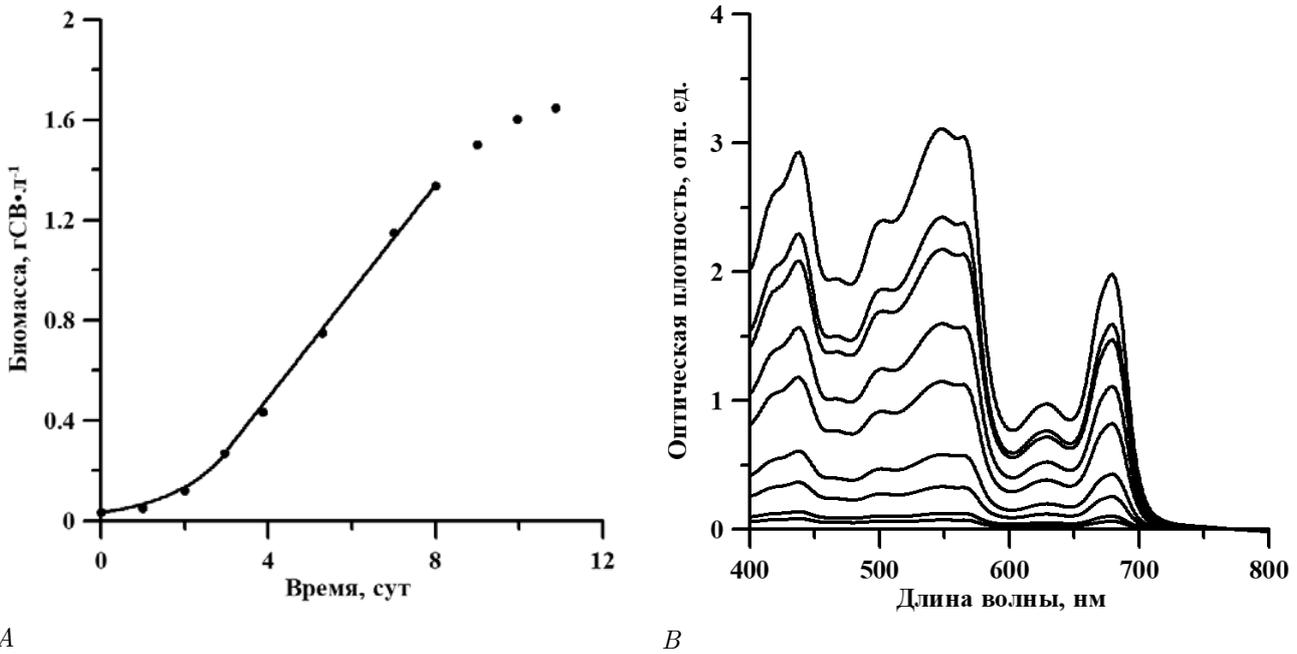


Рис. 1. Накопительная кривая роста культуры *P. purpureum* (A). Сплошные линии — аппроксимации экспоненциальной (0 — 3 сутки) и линейной (3 — 8 сутки) фаз. Истинные спектры поглощения культуры *P. purpureum*, скомпенсированные на рассеяние (B)
 Fig. 1. Batch growth curves of *P. purpureum* culture (A). Solid lines are approximations of exponential (0 — 3 days) and linear (3 — 8 days) phases. True absorption spectra of *P. purpureum* culture compensated for scattering (B)

Контур второй производной похож на спектр поглощения, но его полосы имеют более тонкую организацию [15]. Производная второго порядка (отрицательные области) позволяет точно выявить скрытые дополнительные максимумы в общем спектре поглощения (рис. 2, A). Можно предположить, что выявленные явные максимумы связаны с определенными полосами поглощения основных пигментов красной микроводоросли *P. purpureum*. Полученные данные послужили начальными точками максимумов пиков при аппроксимации спектра кривыми Гаусса. Каждый отдельный пик был описан формулой (6):

$$D(\lambda) = D_{max} \cdot e^{-0,5 \cdot \left(\frac{\lambda_i - \lambda_{max}}{\sigma}\right)^2} \quad (6)$$

где $D(\lambda)$ — оптическая плотность, отн. ед; D_{max} — амплитуда пика, отн. ед; λ_i — длина волны, нм; λ_{max} — положение максимума пика, нм; σ — полуширина пика, нм.

Для описания спектра поглощения нативной формы хлорофилла *a* в работах [7; 16] приводится 4 кривых Гаусса с максимумами 415, 435, 623, 675 нм. Пик хл *a* в области 680 нм необходимо разделить на 2 кривых (673 и 683 нм). Такое разделение основано на дифференциальном спектре — появление двух максимумов в области 680 нм. Аппроксимация спектра поглощения культуры *P. purpureum* подтвердила, что в области 680 нм пик хл *a* необходимо разделять на две составляющие, при этом коэффициент детерминации приближается к 1 (рис. 2, B). Нативные каротиноиды у [16] описываются двумя кривыми Гаусса с максимумами 489, 532 нм. В нашем случае (рис. 2, C) в процессе приближения функции к нативному спектру поглощения получены 2 кривые Гаусса с максимумами 465 и 490 нм. У фикобилиновых пигментов форма и положение максимумов практически не изменяются при переходе от экстрактов к нативным формам [10; 17]. На основе полученных данных о спектрах поглощения пигментов на рис. 2, (B – F) приведены модели отдельных пигментов.

Таким образом, модель спектра поглощения культуры *P. purpureum* представляет собой сумму спектров хл *a* и В-ФЭ, R-фикоцианина, аллофикоцианина и кр:

$$D(\lambda) = D_{BPE}(\lambda) + D_{RPC}(\lambda) + D_{APC}(\lambda) + D_{chla}(\lambda) + D_{car}(\lambda), \quad (7)$$

$$D_{BPE}(\lambda) = C_{BPE} \cdot \varepsilon_{BPE} \left(0,25 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 493,3}{19,0}\right)^2} + 0,99 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 543,2}{23,2}\right)^2} + 0,4 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 570,1}{8,3}\right)^2} \right),$$

$$D_{RPC}(\lambda) = C_{RPC} \cdot \varepsilon_{RPC} \left(0,31 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 545,3}{32,8}\right)^2} + 0,26 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 552,7}{12,9}\right)^2} + 0,33 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 585,9}{14,3}\right)^2} + 0,94 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 617}{14,4}\right)^2} \right),$$

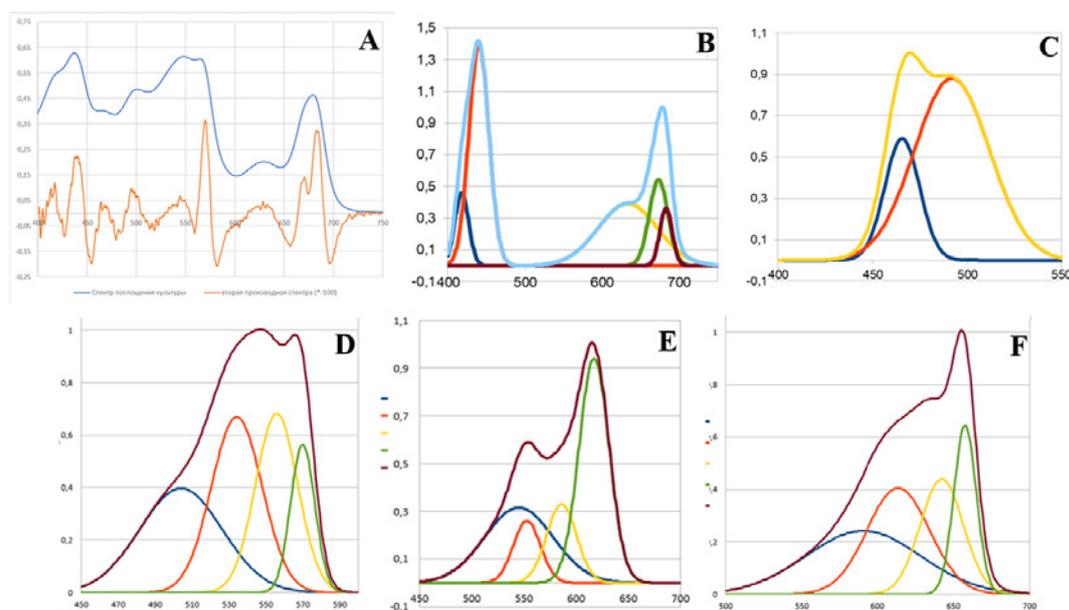


Рис. 2. Спектр поглощения культуры микроводоросли *P. purpureum*, нормированный по значению D_{678} и вторая производная спектра (умноженная на (-100)) (A). Математическая модель спектра хл *a* (B), кр (C), В-ФЭ (D), R-фикоцианина (E) и аллофикоцианина (F)

Fig. 2. Absorption spectrum of microalgae *P. purpureum* normalized by D_{678} value and the second derivative of the spectrum (multiplied by (-100))(multiplied by (-100)) (A). Mathematical model of the spectrum of chl *a* (B), car (C), B-PE (D), R-ficocyanin (E), and allophycocyanin (F)

$$D_{APC}(\lambda) = C_{APC} \cdot \varepsilon_{APC} \left(0,24 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 590,5}{37,7} \right)^2} + 0,40 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 613,6}{20,6} \right)^2} + 0,43 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 642,3}{14,1} \right)^2} + 0,64 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 657,6}{7,3} \right)^2} \right),$$

$$D_{chla}(\lambda) = C_{chla} \cdot \varepsilon_{chla} \left(0,38 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 633,6}{40,8} \right)^2} + 0,53 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 673,6}{12,3} \right)^2} + 0,35 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 683,3}{8,1} \right)^2} + 1,39 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 440,2}{12,99} \right)^2} + 0,45 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 417,8}{9,03} \right)^2} \right),$$

$$D_{car}(\lambda) = C_{car} \cdot \varepsilon_{car} \left(0,59 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 465,5}{9,1} \right)^2} + 0,88 \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\lambda_i - 491,8}{19,8} \right)^2} \right),$$

где $D(\lambda)$ — общая оптическая плотность; $D_{BPE}(\lambda)$ — оптическая плотность В-фикоэритрина; $D_{RPC}(\lambda)$ — оптическая плотность R-фикоцианина; $D_{APC}(\lambda)$ — оптическая плотность аллофикоцианина; $D_{chla}(\lambda)$ — оптическая плотность хлорофилла *a*; $D_{car}(\lambda)$ — оптическая плотность суммарных каротиноидов; C_{BPE} — концентрация В-фикоэритрина ($\text{г} \cdot \text{л}^{-1}$); C_{RPC} — концентрация R-фикоцианина ($\text{г} \cdot \text{л}^{-1}$); C_{APC} — концентрация аллофикоцианина ($\text{г} \cdot \text{л}^{-1}$); C_{chla} — концентрация хлорофилла *a* ($\text{г} \cdot \text{л}^{-1}$); C_{car} — концентрация суммарных каротиноидов ($\text{г} \cdot \text{л}^{-1}$); ε_{BPE} — экстинкция В-фикоэритрина $10 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$; ε_{RPC} — экстинкция R-фикоцианина $7 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$; ε_{APC} — экстинкция аллофикоцианина $5,8 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$; ε_{chla} — экстинкция хлорофилла *a* $88,15 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$; ε_{car} — экстинкция суммарных каротиноидов $2500 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$.

На рис. 3 представлен пример разделения спектра поглощения культуры микроводоросли *P. purpureum* на отдельные кривые Гаусса методом аппроксимации моделью (7). Предлагаемый способ декомпозиции спектра может быть использован как экспресс-метод определения концентрации пигментов без их выделения в чистом виде, что важно при работе с накопительными культурами без вмешательства в процессы их роста.

Верификация модели

Для верификации полученных результатов была проведена серия параллельных измерений концентрации хл *a*, кр и В-ФЭ по стандартным методикам и предлагаемой модели (7). Сравнение результатов представлено на рис. 4.

Согласно рис. 4, значения концентраций В-ФЭ, хл *a* и кр, полученные с помощью стандартного метода, а также концентрации, определенные методом разложения истинных спектров поглощения на кривые Гаусса, коррелируют между собой с высокой точностью ($R^2 > 0,95$). Для определения концентрации хл *a* в обоих методах использовался коэффициент экстинкции в ацетоновом экстракте $88,15 \text{ л} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ [18].

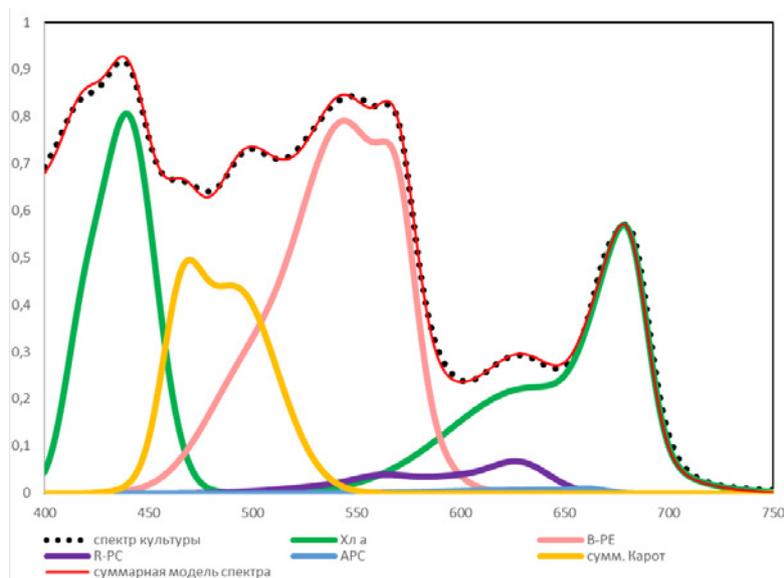


Рис. 3. Пример разделения спектра поглощения культуры микроводоросли *P. purpureum* на отдельные кривые Гаусса методом аппроксимации. Черными точками показан спектр поглощения культуры; зеленая линия — спектр хлорофилла *a*, розовая — В-фикоэритрина; фиолетовая — R-фикоцианина; синяя — аллофикоцианина; желтая — суммарных каротиноидов; красная — суммарная модель спектра
 Fig. 3. Example of separation of the absorption spectrum of the microalgae *P. purpureum* into separate Gaussian curves by approximation. Black dots show the absorption spectrum of the culture; green line — chlorophyll *a* spectrum, pink — B-phycoerythrin; purple — R-phycoeyanin; blue — allophycoyanin; yellow — total carotenoids; red — total spectrum model

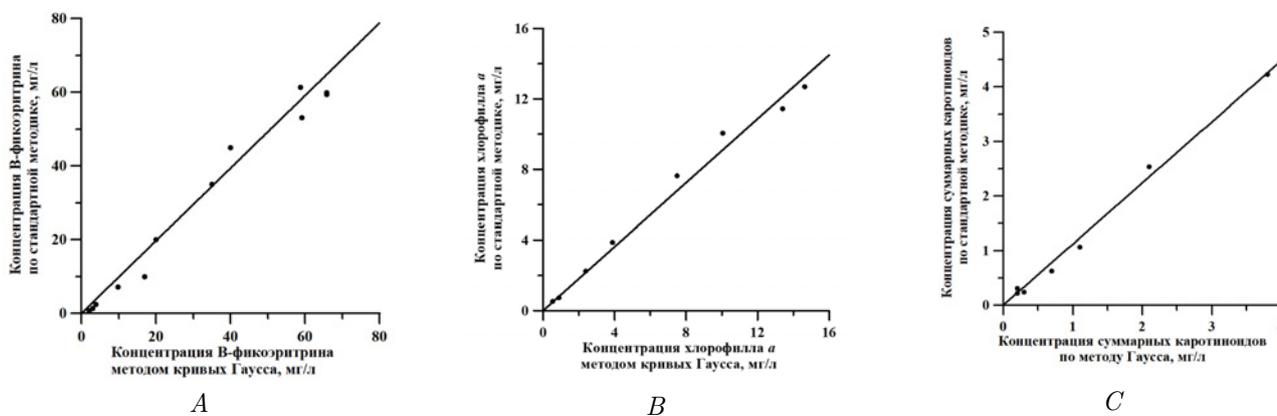


Рис. 4. Концентрация В-фикоэритрина (А), хлорофилла *a* (В) и суммарных каротиноидов (С), определенных по стандартной методике (1–3) и при помощи модели (6). Значения углов наклона прямой во всех вариантах близки к 1 ($R^2 > 0,95$)
 Fig. 4. Concentrations of B-phycoerythrin (A), chlorophyll *a* (B) and total carotenoids (C) determined using the standard technique (1–3) and model (5). The values of the angles of slope of the straight line in all variants are close to 1 ($R^2 > 0,95$)

Известно, что нативный коэффициент экстинкции не совпадает с эталонным значением для ацетонового экстракта. В работе [19] коэффициент экстинкции хлорофилла *a* в нативной форме равен $76 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$, а по данным [20] нативный коэффициент экстинкции хлорофилла *a* составляет $67,5 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ в максимуме поглощения 678 нм. Одним из объяснений различия между нативным коэффициентом экстинкции и коэффициентом экстинкции в ацетоновом растворе является эффект "упаковки" пигментов в клетках. Результаты расчетов показывают, что при экстинкции хл *a* $88,15 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ коэффициент корреляции (тангенс угла наклона) равен 0,9 (рис. 4 Б). Если при расчете концентрации хл *a* с помощью модели (7) использовать экстинкции $100 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$, то коэффициент корреляции будет равен 1. Коэффициенты экстинкции В-ФЭ и кр не изменяются при переходе от экстрактов к нативным формам, поэтому в модели их значения составили $10 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ и $2500 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ соответственно. Следует отметить, что для

определения концентрации фикобилипротеинов и суммарных каротиноидов необходимо аппроксимировать спектр поглощения культуры моделью (7). Для расчета концентрации хл *a* достаточно использовать значение оптической плотности при длине волны 680 нм, которое необходимо разделить на экстинкцию, так как поглощение других пигментов не влияет на оптическую плотность в этой области.

Заключение

В работе на основе анализа методов определения концентрации основных фотосинтетических пигментов: В-фикоэритрина, хлорофилла *a* и суммарных каротиноидов разработана модель спектра поглощения культуры *P. purpureum*. Установлено, что метод кривых Гаусса с высокой точностью коррелирует со стандартными биохимическими методиками и может быть использован как экспресс-метод определения концентрации основных фотосинтетических пигментов *P. purpureum* без вмешательства в ход эксперимента. Однако предложенная модель не позволяет провести разделение каротиноидов (бета-каротина и зеоксантина). Отметим, что при работе с моделью (7) необходимо использовать только истинный спектр поглощения культуры, который, в свою очередь, должен быть записан на спектрофотометре, оснащенный интегрирующей сферой.

Работа выполнена в рамках госзадания ФИЦ "Институт биологии южных морей имени А.О. Ковалевского РАН", "Комплексное исследование механизмов функционирования биотехнологических комплексов с целью получения активных веществ из гидробионтов" (№ гос. регистрации 1023032700554-2-1.6.16)

Литература

- [1] Akimoto M., Shirai A., Ohtaguchi K., Koide K. Carbon dioxide fixation and polyunsaturated fatty acid production by the red alga *Porphyridium cruentum*. // Applied Biochemistry and Biotechnology. 1998. Vol. 73. Pp. 269–278. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02785661>.
- [2] Gantt E., Lipschultz C.A. Phycobilisomes of *Porphyridium cruentum*. Pigment analysis. // Biochemistry. 1974. Vol. 13. Pp. 2960–2966. DOI: <https://doi.org/10.1021/bi00711a027>.
- [3] Bidigare R.R. et al. In-vivo absorption properties of algal pigments // Proceedings SPIE 1302, Ocean Optics X. 1990. Vol. 1302. P. 290–302. DOI: <https://doi.org/10.1117/12.21451>.
- [4] Копытов Ю.П., Лелеков А.С., Геворгиз Р.Г., Нехорошев М.В., Новикова Т.М. Методика комплексного определения биохимического состава микроводорослей // Альгология. 2015. Т. 25, № 1. С. 35–40. DOI: <https://doi.org/10.15407/alg25.01.035>. EDN: <https://elibrary.ru/yndcgr>.
- [5] Poojary M.M., Barba F.J., Aliakbarian B., Donsi F., Pataro G., Dias D.A., Juliano P. Innovative alternative technologies to extract carotenoids from microalgae and seaweeds // Marine Drugs. 2016. Vol. 14, Issue 11. P. 214. DOI: <http://doi.org/10.3390/md14110214>.
- [6] Kadam S.U., Tiwari B.K., O'Donnell C.P. Application of Novel Extraction Technologies for Bioactives from Marine Algae // Journal of Agricultural and Food Chemistry. 2013. Vol. 61, Issue 20. Pp. 4667–4675. DOI: <http://doi.org/10.1021/jf400819p>.
- [7] Kupper H., Seibert S., Parameswaran A. Fast, sensitive, and inexpensive alternative to analytical pigment HPLC: quantification of chlorophylls and carotenoids in crude extracts by fitting with Gauss peak spectra // Analytical Chemistry. 2007. Vol. 79, Issue 20. Pp. 7611–7627. DOI: <https://doi.org/10.1021/ac070236m>.
- [8] Тренкеншу Р.П., Терсков И.А., Сидько Ф.Я. Плотные культуры морских микроводорослей. // Известия Сибирского отделения Академии наук СССР. Серия биологических наук. 1981. Т. 5, № 1. С. 75–82. URL: https://www.researchgate.net/publication/333056415_Plotnye_kultury_morskih_mikrovodoroslej_Izvestia_Sibirskogo_otdelenia_Akademii_nauk_SSSR_Seria_biologiceskih_nauk_1981_T_5_No_1_S_75-82.
- [9] Тренкеншу Р.П., Лелеков А.С., Боровков А.Б., Новикова Т.М. Унифицированная установка для лабораторных исследований микроводорослей // Вопросы современной альгологии. 2017. № 1 (13). С. 28. URL: <http://www.algology.ru/1097?ysclid=lswxthzikl382360690>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=29800911>. EDN: <https://elibrary.ru/zcdlww>.
- [10] Стадничук И.Н. Фикобилипротеины. Москва: ВИНТИ, 1990. 193 с.
- [11] Геворгиз Р.Г. Количественное определение массовой доли хлорофилла *a* в сухой биомассе *Spirulina (Arthrospira) platensis* North. Geitl: учебно-методическое пособие. Севастополь, 2017. 11 с. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=46527794>. EDN: <https://elibrary.ru/cckhfn>.
- [12] Геворгиз Р.Г., Нехорошев М.В. Количественное определение массовой доли суммарных каротиноидов в сухой биомассе *Spirulina (Arthrospira) platensis* North. Geitl: учебно-методическое пособие / РАН, Ин-т морских биологических исследований им. А.О. Ковалевского. Севастополь, 2017. 12 с. (Препринт / РАН, ИМБИ). URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=44180447>. EDN: <https://elibrary.ru/zoqmpj>.

- [13] Merzlyak M.N., Naqvi K.R. On recording the true absorption and the scattering spectrum of a turbid sample: Application to cell suspensions of the cyanobacterium *Anabaena variabilis* // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. 2000. Vol. 58, Issues 2–3. Pp. 123–129. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1011-1344\(00\)00114-7](https://doi.org/10.1016/S1011-1344(00)00114-7).
- [14] Клочкова В.С., Лелеков А.С., Гудвилович И.Н. Динамика концентрации хлорофилла *a* и В-фикоэритрина в культуре *Porphyridium purpureum* в условиях светового и углеродного лимитирования // Актуальные вопросы биологической физики и химии. 2022. Т. 7, № 4. С. 534–540. DOI: <https://doi.org/10.29039/rusjbpс.2022.0556>. EDN: <https://elibrary.ru/tznenw>.
- [15] Гуляев Б.А., Литвин Ф.Ф. Первая и вторая производная спектра поглощения хлорофилла и сопровождающих пигментов в клетках высших растений и водорослей при 20 °С // Биофизика. 1970. Т. 15, № 4. С. 670–680. URL: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/4990547/>.
- [16] Hoerffner N., Sathyendranath S. Effect of pigment composition on absorption properties of phytoplankton // Marine Ecology Progress Series. 1991. Vol. 73, Issue 1. Pp. 11–23. URL: <https://fliphtml5.com/pqff/hlfk>.
- [17] Чернышев Д.Н., Клочкова В.С., Лелеков А.С. Разделение спектра поглощения культуры *Porphyridium purpureum* (Bory) Ross. в красной области // Вопросы современной альгологии. 2022. № 1 (28). С. 25–34. DOI: [https://doi.org/10.33624/2311-0147-2022-1\(28\)-25-34](https://doi.org/10.33624/2311-0147-2022-1(28)-25-34). URL: <http://www.algology.ru/1777?ysclid=lsx2qj84fd245034257>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=49416344>. EDN: <https://elibrary.ru/ioaumg>.
- [18] Jeffrey S.W., Mantoura R.F.C., Wright S.W. Phytoplankton pigments in oceanography: guidelines to modern methods. UNESCO, 1997. 661 p. URL: <https://typeset.io/papers/phytoplankton-pigments-in-oceanography-guidelines-to-modern-1nz2k808fz?ysclid=lsx319hon763087631>.
- [19] Myers J., Graham J.R., Wang R.T. On spectral control of pigmentation in *Anacystis nidulans* (Cyanophyceae). // Journal of Phycology. 1978. Vol. 14, Issue 4. Pp. 513–518. DOI: <http://doi.org/10.1111/j.1529-8817.1978.tb02478.x>.
- [20] Arnon D.I., McSwain B.D., Tsujimoto H.Y., Wada K. Photochemical activity and components of membrane preparations from blue-green algae. I. Coexistence of two photosystems in relation to chlorophyll *a* and removal of phycocyanin // Bioch. Biophys. Acta. 1974. Vol. 357, Issue 2. Pp. 231–245. DOI: [http://doi.org/10.1016/0005-2728\(74\)90063-2](http://doi.org/10.1016/0005-2728(74)90063-2).



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-122-131

Submitted: 15.01.2024

Revised: 20.02.2024

Accepted: 28.02.2024

D.N. Chernyshev

Sevastopol State University, Sevastopol, Russian Federation

E-mail: chernishev@gmail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8120-7382>

V.S. Klochkova

Sevastopol State University, Sevastopol, Russian Federation

E-mail: wiki-iki@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2120-9589>

A.S. Lelekov

A.O. Kovalevsky Institute of Biology of the Southern Seas, Russian Academy of Sciences, Sevastopol,

Russian Federation

E-mail: a.lelekov@yandex.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1213-7963>

MODEL OF DECOMPOSITION OF THE NATIVE ABSORPTION SPECTRUM OF *PORPHYRIDIDIUM PURPUREUM* CULTURE

ABSTRACT

A model of the native absorption spectrum of the red seaweed *Porphyrididium purpureum* culture was developed in this work. The mathematical model of each pigment is the sum of Gaussian curves. To level the light scattering, the spectra of the culture were recorded on a spectrophotometer with an integrating sphere. To verify the model, a series of parallel measurements of photosynthetic pigment concentrations using standard biochemical methods and the Gaussian curve method were performed. It was shown that the proposed model with sufficient accuracy makes it possible to determine the concentration of the main photosynthetic pigments of *Porphyrididium purpureum* culture without interfering with its growth processes.

Key words: mathematical model; B-phycoerythrin; chlorophyll *a*; carotenoids; Gauss curves; absorption spectrum.

Citation. Chernyshev D.N., Klochkova V.S., Lelekov A.S. Model of decomposition of the native absorption spectrum of *Porphyridium purpureum* culture. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 122–131. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-122-131>. (In Russ.)

Information about the conflict of interests: authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Chernyshev D.N., Klochkova V.S., Lelekov A.S., 2024

Dmitriy N. Chernyshev — head of laboratory, Department of Physics, Sevastopol State University, 33, Universitetskaya Street, Sevastopol, 299053, Russian Federation.

Victoria S. Klochkova — engineer, Department of Physics, Sevastopol State University, 33, Universitetskaya Street, Sevastopol, 299053, Russian Federation.

Alexander S. Lelekov — Candidate of Biological Sciences, senior researcher, Department of Biotechnology and Phytoresources, A.O. Kovalevsky Institute of Biology of the Southern Seas, Russian Academy of Sciences, 2, Nakhimov Avenue, Sevastopol, 299011, Russian Federation.

References

- [1] Akimoto M., Shirai A., Ohtaguchi K., Koide K. Carbon dioxide fixation and polyunsaturated fatty acid production by the red alga *Porphyridium cruentum*. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 1998, vol. 73, pp. 269–278. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02785661>.
- [2] Gantt E., Lipschultz C.A. Phycobilisomes of *Porphyridium cruentum*. Pigment analysis. *Biochemistry*, 1974, vol. 13, pp. 2960–2966. DOI: <https://doi.org/10.1021/bi00711a027>.
- [3] Bidigare R.R. [et al.] In-vivo absorption properties of algal pigments. *Proceedings SPIE 1302, Ocean Optics X*, 1990, vol. 1302, pp. 290–302. DOI: <https://doi.org/10.1117/12.21451>.
- [4] Kopytov Yu.P., Lelekov A.S., Gevorgiz R.G., Nekhoroshev M.V., Novikova T.M. Method of complex analysis of biochemical composition of microalgae. *Algologia*, 2015, vol. 25, no. 1, pp. 35–40. DOI: <https://doi.org/10.15407/alg25.01.035>. EDN: <https://elibrary.ru/yndcgr>. (In Russ.)
- [5] Poojary M.M., Barba F.J., Aliakbarian B., Donsi F., Pataro G., Dias D.A., Juliano P. Innovative alternative technologies to extract carotenoids from microalgae and seaweeds. *Marine Drugs*, 2016, vol. 14, issue 11, p. 214. DOI: <http://doi.org/10.3390/md14110214>.
- [6] Kadam S.U., Tiwari B.K., O'Donnell C.P. Application of Novel Extraction Technologies for Bioactives from Marine Algae. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2013, vol. 61, issue 20, pp. 4667–4675. DOI: <http://doi.org/10.1021/jf400819p>.
- [7] Kupper H., Seibert S., Parameswaran A. Fast, sensitive, and inexpensive alternative to analytical pigment HPLC: quantification of chlorophylls and carotenoids in crude extracts by fitting with Gauss peak spectra. *Analytical Chemistry*, 2007, vol. 79, issue 20, pp. 7611–7627. DOI: <https://doi.org/10.1021/ac070236m>.
- [8] Trenkenshu R.P., Terskov I.A., Sidko F.Ya. Dense cultures of marine algae. *Izvestiya Sibirskogo otdeleniya Akademii nauk SSSR. Seriya biologicheskikh nauk*, 1981, vol. 5, no. 1, pp. 75–82. Available at: https://www.researchgate.net/publication/333056415_Plotnye_kultury_morskih_mikrovodoroslej_Izvestia_Sibirskogo_otdeleniya_Akademii_nauk_SSSR_Seria_biologicheskikh_nauk_1981_T_5_No_1_S_75-82.
- [9] Trenkenshu R.P., Lelekov A.S., Borovkov A.B., Novikova T.M. Unified installation for microalgae laboratory studies. *Issues of modern algology*, 2017, no. 1 (13), p. 28. Available at: <http://www.algology.ru/1097?ysclid=lswxthzikl382360690>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=29800911>. EDN: <https://elibrary.ru/zcdlww>. (In Russ.)
- [10] Stadnichuk I.N. Phycobiliproteins. Moscow: VINITI, 1990. 193 p. (In Russ.)
- [11] Gevorgiz R.G. Quantitative determination of mass fraction of chlorophyll *a* in dry biomass of *Spirulina (Arthrospira) platensis* North. Geitl: textbook. Sevastopol, 2017, 11 p. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=46527794>. EDN: <https://elibrary.ru/cckhfn>. (In Russ.)
- [12] Gevorgiz R.G., Nekhoroshev M.V. Quantitative determination of the mass fraction of total carotenoids in the dry biomass of *Spirulina (Arthrospira) platensis* North. Geitl: educational and methodological manual. Sevastopol, 2017. 12 p. (Preprint / RAS, IMBI). Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=44180447>. EDN: <https://elibrary.ru/zoqmpj>. (In Russ.)
- [13] Merzlyak M.N., Naqvi K.R. On recording the true absorption and scattering spectrum of a turbid sample: Application to cell suspensions of the cyanobacterium *Anabaena variabilis*. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 2000, vol. 58, issues 2–3, pp. 123–129. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1011-1344\(00\)00114-7](https://doi.org/10.1016/S1011-1344(00)00114-7).

- [14] Klochkova V.S., Lelekov A.S., Gudvilovich I.N. Dynamics of the concentration of chlorophyll a and B-phycoerythrin concentration in culture *Porphyridium purpureum* in conditions of light and carbon limitation. *Modern Trends in Biological Physics and Chemistry*, 2022, vol. 7, no. 4, pp. 534–540. DOI: <https://doi.org/10.29039/rusjbpс.2022.0556>. EDN: <https://elibrary.ru/tznenw>. (In Russ.)
- [15] Guliaev B.A., Litvin F.F. 1st and 2nd derivatives of the absorption spectrum of chlorophyll and accompanying pigments in the cells of higher plants and algae at 20 °C. *Biofizika*, 1970, vol. 15, issue 4, pp. 670–680. Available at: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/4990547/>. In Russ.
- [16] Hoepffner N., Sathyendranath S. Effect of pigment composition on absorption properties of phytoplankton. *Marine Ecology Progress Series*, 1991, vol. 73, issue 1, pp. 11–23. Available at: <https://fliphtml5.com/pqff/hlfk>.
- [17] Chernyshev D.N., Klochkova V.S., Lelekov A.S. Separation of the absorption spectrum of *Porphyridium purpureum* (Bory) Ross. in the red area. *Issues of modern algology*, 2022, no. 1 (28), pp. 25–34. DOI: [https://doi.org/10.33624/2311-0147-2022-1\(28\)-25-34](https://doi.org/10.33624/2311-0147-2022-1(28)-25-34). Available at: <http://www.algology.ru/1777?ysclid=lsx2qj84fd245034257>; <https://elibrary.ru/item.asp?id=49416344>. EDN: <https://elibrary.ru/iaaumg>. (In Russ.)
- [18] Jeffrey S.W., Mantoura R.F.C., Wright S.W. Phytoplankton pigments in oceanography: guidelines to modern methods. UNESCO, 1997, 661 p. Available at: <https://typeset.io/papers/phytoplankton-pigments-in-oceanography-guidelines-to-modern-1nz2k808fz?ysclid=lsx319hon763087631>.
- [19] Myers J., Graham J.R., Wang R.T. On spectral control of pigmentation in *Anacystis nidulans* (Cyanophyceae). *Journal of Phycology*, 1978, vol. 14, issue 4, pp. 513–518. DOI: <http://doi.org/10.1111/j.1529-8817.1978.tb02478.x>.
- [20] Arnon D.I., McSwain B.D., Tsujimoto H.Y., Wada K. Photochemical activity and components of membrane preparations from blue-green algae. I. Coexistence of two photosystems in relation to chlorophyll a and removal of phycocyanin. *Bioch. Biophys. Acta.*, 1974, vol. 357, issue 2, pp. 231–245. DOI: [http://doi.org/10.1016/0005-2728\(74\)90063-2](http://doi.org/10.1016/0005-2728(74)90063-2).

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

Журнал "Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series" издается с 1995 г. и является регулярным научным изданием, выпускаемым Самарским университетом с целью развития научно-исследовательской деятельности, поддержки ведущих научных школ и подготовки кадров высшей квалификации. Журнал выходит как в печатном, так и в электронном виде. Электронная версия журнала размещается на сайте Самарского университета по адресу <https://journals.ssau.ru/est>. Все статьи проходят проверку в программе "Антиплагиат".

В журнале "Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series" печатаются оригинальные научные результаты из различных областей естествознания по профилю базы данных zbMath, ранее не публиковавшиеся и не представленные к публикации в других изданиях. **Ежегодно выходят в свет четыре регулярных выпуска журнала.**

Представляемая в журнал работа должна быть законченным научным исследованием и содержать новые научные результаты. Статьи должны подписываться всеми авторами, что означает их согласие на передачу всех прав на распространение работ с помощью печатных и электронных носителей информации Самарскому университету. Статьи могут быть написаны на русском или английском языках, при этом авторы обязаны предъявлять повышенные требования к стилю изложения и языку. Статьи должны сопровождаться направлением организации, в которой выполнена работа. Статьи обзорного характера, рецензии на научные монографии пишутся, как правило, по просьбе редколлегии журнала. Все представленные работы редакция журнала направляет на рецензирование. Решение об опубликовании принимается редколлегией журнала на основании рецензии. Авторам рекомендуется ознакомиться с правилами подготовки статей перед представлением их в редакцию. Работы, оформленные не по правилам, редколлегией рассматриваться не будут. **Редакция просит авторов при оформлении работы придерживаться следующих правил и рекомендаций:**

1. Статьи представляются через сайт <https://journals.ssau.ru/est>.
 2. Статья должна содержать: название работы (без формул), список авторов, представленный в алфавитном порядке, с указанием места работы и его адреса с индексом, адресов электронной почты каждого из них, звания, должности, ORCID на русском и английском языках; аннотацию не менее 100 слов на русском и английском языках, которая дается перед основным текстом; основной текст, который рекомендуется разделять на подразделы с целью облегчения чтения работы; заключение с краткой характеристикой основных полученных результатов.
 3. Статья должна быть снабжена индексом универсальной классификации (УДК), необходимо представить ключевые слова на русском и английском языках.
 4. Объем статьи не должен превышать 15–25 страниц, иллюстрированного не более чем 5 рисунками и 5 таблицами. Базовый размер шрифта — 10 пунктов. Опубликование работ, не соответствующих этим ограничениям, возможно только после специального решения редколлегии журнала.
 5. Подписи к рисункам должны размещаться снизу от рисунка и должны содержать их краткое описание и, возможно, объяснение использованных символов и условных обозначений.
 6. Указатель таблицы должен быть размещен справа сверху от таблицы. Заголовок таблицы (как и сама таблица) должен быть отцентрирован по ширине основного текста.
 7. Нумерация рисунков и таблиц должна быть пораздельной по тексту статьи. Не допускается размещать в тексте рисунки и таблицы до появления на них ссылки в тексте.
 8. Текст статьи должен быть подготовлен средствами издательской системы $\text{\LaTeX}_2\epsilon$ с использованием стиля `samgu.cls`. Стил `samgu.cls` и пример оформления статьи можно найти на сайте Самарского государственного университета (адрес указан выше). Использование других реализаций \TeX 'а крайне нежелательно. Подготовка электронной версии статьи с помощью других средств должна быть заранее согласована с редакцией. Иллюстративный материал (рисунки, таблицы, диаграммы) готовится стандартными средствами \LaTeX 'а. Рисунки могут быть также подготовлены в любом графическом редакторе и представлены в формате EPS. Электронные представления фотографий допускаются только в форматах EPS или TIFF с разрешением не менее 600 dpi. В случае использования нестандартных стилевых файлов автор обязан предоставить редакции необходимые стилевые файлы. Изменения стандартных стилевых файлов недопустимы.
 9. При подготовке электронного варианта статьи следует принимать во внимание следующие рекомендации:
 - а) при наборе статьи необходимо различать следующие знаки препинания и контрольные последовательности, им соответствующие: одинарный дефис ("."), двойной дефис ("—")¹, тройной дефис ("—")². Одинарный дефис используют в составных словах; двойной дефис рекомендуется для указания диапазона чисел и "двойных" фамилий; тройной дефис означает тире;
 - б) допустимо использование только обратных кавычек ("") с помощью контрольной последовательности `\textquotedblright`;
 - в) недопустимо нахождения рядом двух и более закрывающих или открывающих скобок одного вида. Рекомендуется внимательно относиться к балансу скобок;
 - г) допускается использование следующих команд переключения шрифтов: `\rm`, `\it`, `\bf`, `\sl` и стандартных шрифтов семейства AMS с использованием следующих команд переключения шрифтов `\mathbf`, `\mathcal`, `\mathfrak`. Использование других шрифтов должно быть согласовано с редакцией журнала;
 - д) на графиках должна быть нанесена сетка (желательно квадратная) с обозначением делений. Рекомендуемый размер рисунков — 11–15 см по горизонтали и 5–15 см по вертикали. Необходимо тщательно следить за точным соответствием обозначений в тексте и на рисунках и за подбором шрифтов. Надписи, загромождающие рисунки, должны быть заменены цифрами или буквенными обозначениями и внесены в подрисуночные подписи. Сами подрисуночные подписи должны быть, по возможности, краткими. Редакция оставляет за собой право требовать от автора более качественного выполнения графического материала;
 - е) для математических обозначений рекомендуется употреблять, по возможности, стандартные и наиболее простые символы. Не следует применять индексы из букв русского алфавита. Векторы и тензоры выполняются жирным шрифтом. Вместо одинаковых повторяющихся блоков в формулах желательно использовать их сокращенные обозначения;
 - ж) при нумерации формул редакция просит пользоваться десятичной системой. Рекомендуется двойная нумерация: первая цифра — номер раздела статьи, вторая цифра после точки — номер формулы внутри раздела. Номер должен стоять справа от формулы. Не следует нумеровать формулы, на которые нет ссылки в тексте;
 - з) теоремы, леммы, примеры, утверждения и т.п. выполняются обычным шрифтом; их заголовки даются жирным шрифтом;
 - и) список литературы составляется по порядку цитирования, располагается в конце статьи на русском и английском языках (не менее 10 пунктов). Для книг сообщается следующая информация: фамилии и инициалы авторов, полное название книги, издательство, год издания и количество страниц; для статей в сборниках и журналах — фамилии и инициалы авторов, полное название статьи, название журнала (сборника) полностью или, если есть стандартное сокращение, сокращенно, полная информация об издании (серия, том, номер, выпуск, год), номера начальной и конечной страниц статьи;
 - к) ссылки на иностранные источники (включая переведенные на русский язык статьи и книги) даются обязательно на языке оригинала и сопровождаются в случае перевода на русский язык с указанием названия и выходных данных перевода.
- Цитирование осуществляется командой `\cite` с соответствующей меткой. Ссылки на неопубликованные работы недопустимы. Невыполнение авторами перечисленных выше правил может повлечь за собой задержку с опубликованием работы.
- В журнале дается указание на дату поступления работы в редакцию и даты ее принятия. Просьба редакции о переработке статьи не означает, что статья принята к печати; после переработки статья вновь рассматривается редколлегией журнала.

Редакция журнала

¹Соответствующая контрольная последовательность есть `\cdash--`

²Соответствующая контрольная последовательность есть `\cdash---`