

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

ТОМ 11, № 1
2018

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2018

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Сулис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр
мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ».

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.
<http://ntv.spbstu.ru/physics>

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



**ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL**

Physics
and Mathematics

VOLUME 11, No. 1
2018

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2018

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
V.A. Glukhikh – full member of RAS;
D.A. Indeitsev – corresponding member of RAS;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
R.A. Suris – full member of RAS;
D.A. Varshalovich – full member of RAS;
A.E. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sc. (Biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia.
J.B. Malherbe – Dr. Sc. (Physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.E. Privalov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnikeskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2018

Содержание

Физика конденсированного состояния

| | |
|--|----|
| Абросимов А.С., Агарев В.Н. Численное моделирование резонансно-туннельных структур на основе барьера Шоттки и гетероперехода GaAs/AlGaAs | 9 |
| Трегулов В.В., Степанов В.А., Мельник Н.Н. Свойства полупроводниковой структуры с p–n-переходом, сформированной в пленке пористого кремния под действием лазерного излучения (статья на английском языке) | 18 |
| Платко А.П., Сотова Ю.И., Гороховатский Ю.А., Карулина Е.А., Галиханов М.Ф. Электретный эффект в биоразлагаемых полимерных пленках полилактида с наноразмерным оксидом магния в качестве наполнителя | 26 |
| Жуков Н.Н., Марченко А.В., Шахович К.Б. Эмиссионные мессбауэровские спектры дочерних атомов олова, измеренные в условиях подвижного радиоактивного равновесия материнских изотопов теллура с дочерними изотопами сурьмы | 34 |
| Клинов В.А. Спектрально-люминесцентные свойства активированных фторалюминатных стекол, перспективных для создания оптических температурных сенсоров | 44 |

Математическое моделирование физических процессов

| | |
|---|----|
| Исаенко И.И., Махнов А.В., Смирнов Е.М., Шмидт А.А. Моделирование кавитации в высокоскоростных течениях в каналах | 55 |
| Чуляева Е.Г., Кузнецов С.Н., Огнев Б.И. Концепция построения сети беспроводной оптической связи между надводными кораблями | 66 |
| Чумаков Ю.С., Левченя А.М., Малах Х. Формирование вихревой структуры в окрестности стыка кругового цилиндра с вертикальной нагретой поверхностью | 73 |
| Быков Н.Ю. О моделировании процесса образования кластеров при сферическом расширении водяного пара в вакуум | 86 |

Физическое материаловедение

| | |
|--|-----|
| Мамонтов А.И., Петраков А.П., Зимин С.П. Пористость и морфология поверхности слоев селенида свинца – селенида олова на кремниевых подложках по данным рентгено-дифракционных исследований | 102 |
| Хрипунов А.К., Степанова Т.П., Сапрыкина Н.Н., Астапенко Э.П., Романов Д.П., Ткаченко А.А., Капралова В.М. Морфология высушенных наногель-пленок бактериальной целлюлозы, пропитанных раствором нитрата серебра | 112 |

Ядерная физика

| | |
|---|-----|
| Басалаев А.Е., Нарышкин Ю.Г. Поиски частиц темной материи на Большом адронном коллайдере | 122 |
|---|-----|

Радиофизика

| | |
|--|-----|
| Черепанов А.С. Распространение электромагнитных волн в трехслойной феррит-диэлектрической структуре | 138 |
|--|-----|

Теоретическая физика

Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С. *Квантование плотности энергии в замкнутой Вселенной* 147

Механика

Беляев А.К., Шурпатов А.О., Ма Ч.-Ч. *Определение контактной силы осевого соударения упругого стержня и недеформируемого ударника*..... 157

Авторский указатель 167

Contents

Condensed matter physics

| | |
|---|----|
| Abrosimov A.S., Agarev V.N. Numerical simulation of the resonance-tunnel structure based on the Schottky barrier and a GaAs/AlGaAs heterojunction | 9 |
| Tregulov V.V., Stepanov V.A., Melnik N.N. Properties of the semiconductor structure with a p-n-junction created in a porous silicon film under laser radiation | 18 |
| Platko A.P., Sotova Yu.I., Gorokhovatskiy Yu.A., Karulina E.A., Galikhanov M.F. Electret effect in biodecomposed polylactide films filled with nanoscale magnesia | 26 |
| Zhukov N.N., Marchenko A.V., Shakhovich K.B. Mössbauer emission spectra of stannum daughter isotopes measured under condition of a dynamic radioactive equilibrium of tellurium parent isotopes and antimony daughter ones | 34 |
| Klinkov V.A. Spectral and luminescent properties of doped fluoroaluminate glasses promising for optical temperature sensors | 44 |

Simulation of physical processes

| | |
|---|----|
| Isaenko I.I., Makhnov A.V., Smirnov E.M., Schmidt A.A. Simulation of high-speed cavitating flows in channels | 55 |
| Chulyaeva E.G., Kuznetsov S.N., Ognev B.I. The concept of building a wireless optical communication network between surface ships | 66 |
| Chumakov Yu.S., Levchenya A.M., Malah H. The vortex structure formation around a circular cylinder placed on a vertical heated plate | 73 |
| Bykov N.Yu. On simulation of cluster formation process under water vapor spherical expansion into vacuum | 86 |

Physical materials technology

| | |
|---|-----|
| Mamontov A.I., Petrakov A.P., Zimin S.P. Porosity and surface morphology of lead selenide – tin selenide layers on silicon substrates: X-ray diffraction studies | 102 |
| Khripunov A.K., Stepanova T.P., Saprykina N.N., Astapenko E.P., Romanov D.P., Tkachenko A.A., Kapralova V.M. Morphology of dried nanogel films of bacterial cellulose impregnated with the silver nitrate solution | 112 |

Nuclear physics

| | |
|---|-----|
| Basalaev A.E., Naryshkin Yu.G. Dark matter searches at the Large Hadron Collider | 122 |
|---|-----|

Radiophysics

| | |
|---|-----|
| Cherepanov A.S. Electromagnetic wave propagation in the three-layer ferrite-dielectric structure | 138 |
|---|-----|

Theoretical physics

Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. *Quantization of the energy density in a closed universe* 147

Mechanics

Belyaev A.K., Shurpatov A.O., Ma Ch.-Ch. *Determining the contact force of an axial collision of an elastic rod with a rigid impactor* 157

Author index..... 167

DOI: 10.18721/JPM.11101

УДК 538.935

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ БАРЬЕРА ШОТТКИ И ГЕТЕРОПЕРЕХОДА GaAs/AlGaAs

А.С. Абросимов, В.Н. Агарев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
г. Нижний Новгород, Российская Федерация

Предложена двухбарьерная резонансно-туннельная структура, состоящая из барьера Шоттки и гетероперехода GaAs/AlGaAs, и рассмотрено ее возможное применение для резонансно-туннельных диодов, работающих при комнатной температуре. Методами численного моделирования произведена оптимизация конфигурации данной структуры. На примере оптимизированной структуры выполнено моделирование вольт-амперной характеристики (ВАХ) и проведен анализ влияния теплового тока на полученную зависимость.

Ключевые слова: численное моделирование; резонансно-туннельные структура; барьер Шоттки; гетеропереход

Ссылка при цитировании: Абросимов А.С., Агарев В.Н. Численное моделирование резонансно-туннельных структур на основе барьера Шоттки и гетероперехода GaAs/AlGaAs // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 9 – 17. DOI: 10.18721/JPM.11101

NUMERICAL SIMULATION OF THE RESONANCE-TUNNEL STRUCTURE BASED ON THE SCHOTTKY BARRIER AND A GaAs/AlGaAs HETEROJUNCTION

A.S. Abrosimov, V.N. Agarev

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
Nizhny Novgorod, Russian Federation

The resonance tunneling diode has been widely studied because of its importance in the field of nanoelectronic technology and its potential applications in very high speed/functionality devices and circuits. Even though much progress has been made in this regard, the most popular structure of these diodes consists of barriers created by heterojunctions only. In this paper, we present numerical simulation results for a two-barrier resonance-tunnel structure consisting of the Schottky barrier and a GaAs/AlGaAs heterojunction. We considered its potential application to the resonance-tunnel diodes working at room temperature. The configuration of this structure was optimized using numerical simulation methods. A current voltage characteristic was simulated by the example of the optimized structure, and the influence of the thermal current on the obtained dependence was analyzed.

Key words: numerical simulation; resonance-tunnel structure; Schottky barrier; heterojunction

Citation: A.S. Abrosimov, V.N. Agarev, Numerical simulation of the resonance-tunnel structure based on the Schottky barrier and a GaAs/AlGaAs heterojunction, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 9 – 17. DOI: 10.18721/JPM.11101

Введение

Резонансно-туннельные диоды на основе полупроводниковых наноразмерных гетероструктур обладают N -образной вольт-амперной характеристикой (ВАХ) с участком отрицательного дифференциального сопротивления и малой инерционностью процесса туннелирования (длительность процесса имеет порядок 10^{-13} с). Поэтому они представляют большой интерес для создания высокоскоростных приборов терагерцового диапазона и цифровых устройств со временем переключения порядка 10^{-12} с и менее. Л.В. Иогансену принадлежит приоритет в идее использовать эффект резонансного туннелирования электронов в слоистых тонкопленочных структурах металл – диэлектрик для создания электронных интерферометров, тонкопленочных диодов, триодов и т. п. [1 – 3].

Исследование резонансно-туннельных структур

В работе [4] исследовались ВАХ структуры $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$ с различными соотношениями толщины барьеров и квантовой ямы. Для всех исследуемых структур резонансный ток наблюдался только при низких температурах (77 К и ниже); при комнатной же температуре все эффекты, связанные с туннелированием, исчезали. Авторы объяснили это размытием локальных уровней в квантовой яме и невысоким барьером, который легко преодолевается электронами с относительно высокой для комнатной температуры энергией.

С другой стороны, понижение температуры до 4,2 К не приводит к ожидаемому «обострению» туннелирования, что, по видимому, связано с наличием рассеяния на структурных флуктуациях и примесях; это рассеяние также дает уширение локальных уровней.

При температуре 77 К на ВАХ наблю-

дается пик тока, вызванный эффектом резонансного туннелирования, при этом ее смоделированный вид согласуется с экспериментальным. При комнатной температуре эта особенность исчезает.

На величину туннельного тока влияют четыре фактора [5]: толщина барьера, ширина ямы, высота барьера и концентрация примесей в области контактных областей. При этом если три первых фактора определяют высоту пика и поведение зависимости коэффициента прозрачности от энергии электрона, то четвертый обуславливает энергетическое распределение этих электронов на входе в двухбарьерную структуру.

На ВАХ резонансно-туннельного диода влияет также и его материал. Например, высота пика тока i_{max} для структур InAlAs/InGaAs оказывается почти на порядок выше, чем для AlAs/GaAs, при примерно одинаковом соотношении i_{max}/i_{min} [6]. Хорошие результаты дает и использование многобарьерных структур. В такой системе, содержащей последовательность монотонно сужающихся квантовых ям, энергии электронов на эквивалентных уровнях всех ям оказываются одинаковыми [7]. Для этого равенства ширины ям специально подбираются так, чтобы значение разности потенциалов, приложенной к структуре, было равно превышению основного уровня самой узкой квантовой ямы над уровнем Ферми.

При достаточно малой проницаемости барьеров, когда расщепление уровней, обусловленное перекрытием волновых функций электронов в соседних ямах, невелико, на ВАХ структуры наблюдается резкий резонансный пик. Последний образуют электроны, энергии которых заключены в узком интервале вблизи энергии основного состояния самой узкой квантовой ямы.

Методика моделирования

В данной статье мы исследуем двухбарьерную резонансно-туннельную струк-

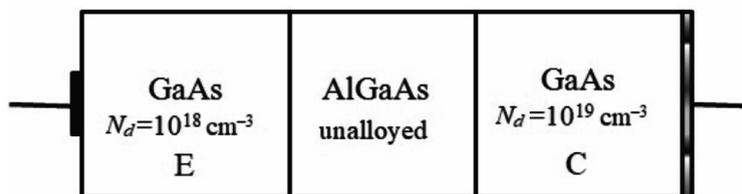


Рис. 1. Схема резонансно-туннельной структуры:
металл коллектора – GaAs (барьер Шоттки); гетеропереход GaAs/AlGaAs (второй барьер);
E, C – эмиттер и коллектор соответственно

туру, в которой обязательно присутствует барьер Шоттки (рис. 1). Он является естественным для контакта металл – арсенид галлия (GaAs) и обусловлен поверхностными состояниями. Его высота для различных металлов составляет примерно 0,8 эВ [8].

Второй барьер представляет собой гетеропереход GaAs/AlGaAs, который может иметь разную высоту (она зависит от доли алюминия). Варьируется также толщина слоя AlGaAs, отвечающего за ширину барьера гетероперехода.

Для моделируемой структуры принималось, что концентрация носителей заряда n достигает значения 10^{19} см^{-3} . Барьер Шоттки с такой концентрацией примесей имеет наименьшую толщину, и такая концентрация технологически реализуется с наименьшим количеством дефектов имплантации.

В нашей модели область барьера Шоттки является обедненным слоем, поэтому распределение внешнего потенциала считаем линейным, при этом его максимум на-

ходится в точке $x = 0$, а нуль – на границе перехода металл – полупроводник (рис. 2). Внешнее напряжение падает между барьером Шоттки (это переход металл – GaAs, который является коллектором) и сильнолегированной областью GaAs, которая служит вторым контактом. Эмиттер структуры находится слева, со стороны барьера гетероперехода, коллектор – справа, со стороны барьера Шоттки (см. рис. 1).

На практике возможно создание резонансно-туннельных диодов с высотой барьера гетероперехода до 0,4 эВ. Этот предел определяется возникновением центров рекомбинации в полупроводнике, и, как следствие, появлением сильных шумов на ВАХ структуры.

В данной работе были проанализированы резонансно-туннельные структуры с высотой барьера от 0,3 до 0,4 эВ. Ток такой структуры рассчитывался как создаваемый электронами, движущимися от эмиттера к коллектору [5]; в результате его плотность следует выражению

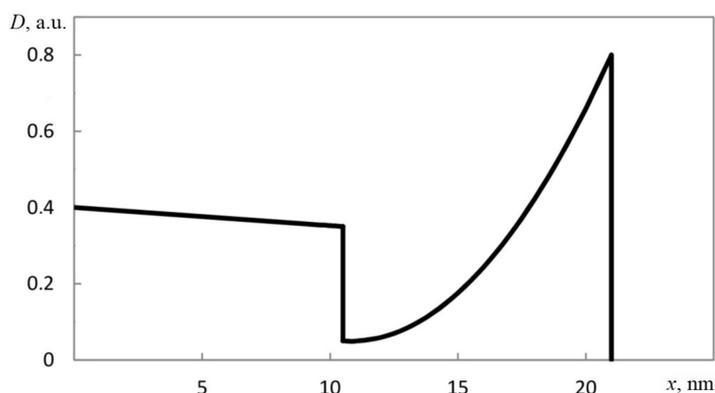


Рис. 2. Энергетическая диаграмма исследуемой структуры при воздействии внешнего напряжения 0,1 В

$$j = \frac{em^*k_B T}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty D(E) \times \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E}{k_B T} \right) \right] dE - \frac{em^*k_B T}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty D(E) \times \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E - eV}{k_B T} \right) \right] dE, \quad (1)$$

где E – энергия; V – напряжение, подаваемое на структуру; $D(E)$ – коэффициент прохождения; E_F – энергия уровня Ферми; T – температура; k_B – константа Больцмана; e , m^* – заряд и эффективная масса электрона.

Значение E_F определяется из решения уравнения электронейтральности

$$\frac{N_d}{1 + \beta^{-1} \exp \left(\frac{E_F - E_d}{k_B T} \right)} = N_c F_{1/2} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right), \quad (2)$$

где β – фактор спинового вырождения ($\beta = 1/2$); N_d – концентрация донорной примеси (в настоящей работе $N_d = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, она берется для слоя **GaAs**, примыкающего к барьеру Шоттки); N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости; $F_{1/2}$ – интеграл Ферми с индексом $1/2$; E_d – энергия донорного уровня.

В арсениде галлия донорный уровень создается кремнием с глубиной залегания ~ 6 мЭВ относительно дна зоны проводимости. Зависимость $D(E)$ мы получили методом, предложенным в работе [9], путем решения уравнения Шрёдингера в одноэлектронном приближении, без учета эффектов рассеяния.

Пусть двухбарьерная структура расположена на расстояниях от 0 до L ; тогда волновая функция берется из уравнения Шрёдингера:

$$\psi'' + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U(x))\psi = 0, \quad (3)$$

где m^* – эффективная масса электрона (для простоты она считается одинаковой во всей рассматриваемой области).

Решением уравнения во внешних областях будут функции следующего вида:

$$\begin{aligned} x \leq 0, \quad \psi &= e^{ikx} + re^{-ikx}; \\ x \geq L, \quad \psi &= de^{ik(x-L)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где r , d – амплитуды отражения и прохождения, соответственно; k – модуль волнового вектора.

Коэффициенты отражения и прохождения следуют выражениям

$$R = |r|^2, \quad D = |d|^2, \quad (5)$$

Граничные условия получим из функций (4):

$$\begin{aligned} \psi(0) &= 1 + r, \quad \psi(L) = d, \\ \psi'(0) &= ik(1 - r), \quad \psi'(L) = ikd. \end{aligned} \quad (6)$$

Выразим амплитуды r и d через функции $\psi(0)$ и $\psi(L)$; тогда граничные условия можно записать как

$$\begin{aligned} \psi'(0) + ik\psi(0) &= 2ik, \\ \psi'(L) - ik\psi(L) &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Уравнение (3) вместе с условиями (7) определяют задачу во внутренней области на расстояниях от 0 до L . Решая эту задачу и отыскивая $\psi(x)$, мы можем найти коэффициенты отражения и прохождения в следующем виде:

$$D = |d|^2 = |\psi(L)|^2, \quad R = |r|^2 = |\psi(0) - 1|^2. \quad (8)$$

Примем полную длину структуры L за единицу, тогда уравнение Шрёдингера примет вид

$$\psi'' + (\varepsilon - U(x))\psi = 0, \quad (9)$$

где энергия ε и потенциал $U(x)$ отсчитываются в единицах $\hbar^2 / 2mL^2$.

Разобьем участок от 0 до L на N областей длиной a . Тогда $L = Na$; и если $L = 1$, то $a = 1/N$.

Для произвольной точки внутри области уравнение (9) можно записать в дискретном виде:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \varepsilon_n \psi_n = 0, \quad (10)$$

$$\varepsilon_n = -2 + a^2(\varepsilon - V_n). \quad (11)$$

Для первого из граничных условий (7) сделаем замену производной волновой

функции на ее дискретный аналог:

$$\psi'(0) \approx (\psi_1 - \psi_{-1}) / 2a.$$

Тогда граничное условие и уравнение Шрёдингера при $x = 0$ имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_1 - \psi_{-1} + 2ika\psi_0 &= 4ika, \\ \psi_1 - \psi_{-1} + \varepsilon_0\psi_0 &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Сложив два уравнения (12) и разделив эту сумму на 2, получим первое граничное условие:

$$\psi_1 + \left(\frac{\varepsilon_0}{2} + ika \right) \psi_0 = 2ika. \quad (13)$$

Для второго граничного условия ($x = N$) аналогично найдем:

$$\begin{aligned} \psi_{N+1} - \psi_{N-1} - 2ika\psi_N &= 0, \\ \psi_{N+1} - \psi_{N-1} + \varepsilon_N\psi_N &= 0, \end{aligned} \quad (14)$$

откуда получим это условие в виде

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{\varepsilon_N}{2} + ika \right) \psi_N = 0. \quad (15)$$

Таким образом, задача состоит в решении системы уравнений (10), (13) и (15).

Трёхдиагональная система уравнений (10) решается модифицированным методом прогонки [10].

Результаты и их обсуждение

На первом этапе моделирования оптимизировалась резонансно-туннельная структура, причем за основу брался коэффициент прохождения $D(E)$, зависящий от ширины и высоты барьера гетероперехода GaAs/AlGaAs; подбирались такие геометрические параметры (высота и ширина) этого барьера, при которых значение коэффициента прохождения принимало наибольшее значение – не менее 70 %.

Пример результата моделирования приведен на рис. 3. Следует обратить внимание на то, что барьеры в рассматриваемой структуре достаточно широки (до 11 нм) и ширина пиков на представленной зависимости $D(E)$ не превышает нескольких десятков миллиэлектронвольт, а именно – ее варьировали от 0,01 до 20 мэВ. Отметим, что полученные нами зависимости $D(E)$ не учитывали эффектов рассеяния при решении уравнения Шрёдингера в одноэлектронном приближении с помощью рассмотренного численного метода.

В структурах с высотой барьера Шоттки 0,30 – 0,35 эВ и шириной 6 – 9 нм наблюдались самые высокие значения коэффициента прохождения. В некоторых из

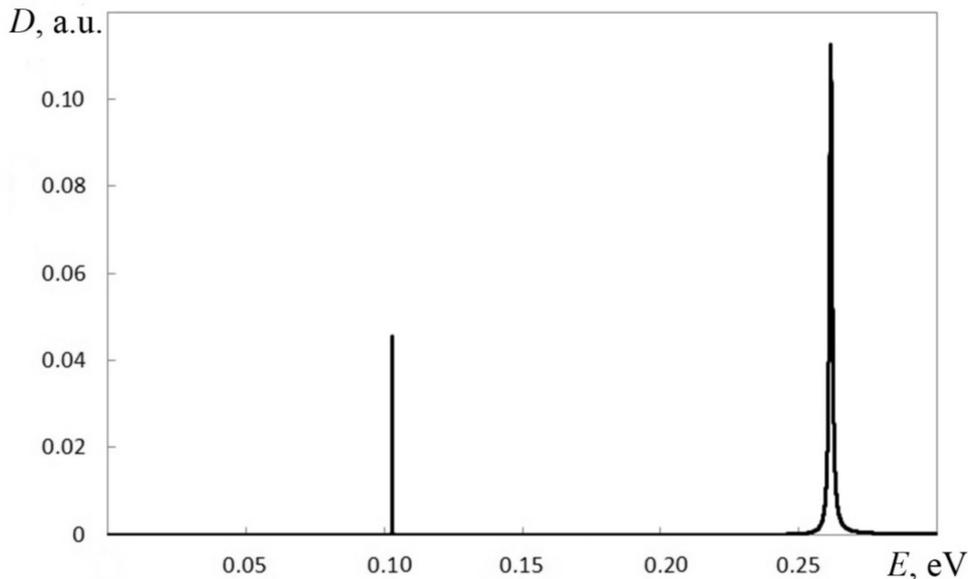


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения от энергии при ширине барьера гетероперехода 6 нм и его высоте 0,3 эВ (результат моделирования)

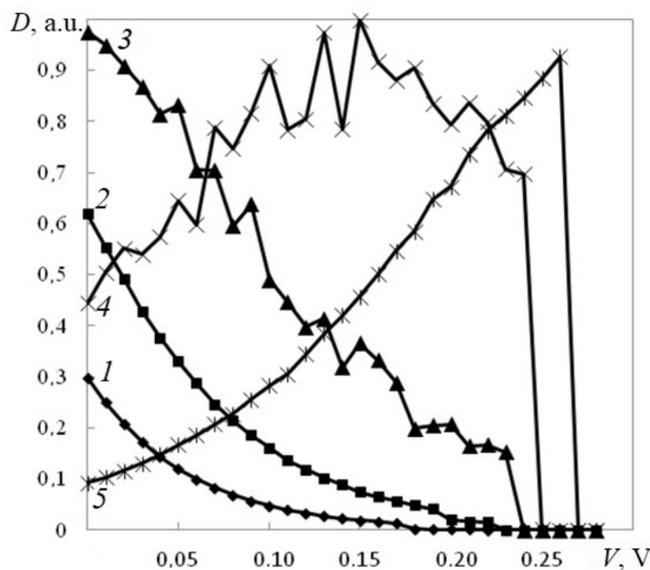


Рис. 4. Зависимости максимального значения коэффициента прохождения от внешнего напряжения при вариации ширины барьера гетероперехода, нм: 11 (кривая 1), 10 (2), 9 (3), 7 (4), 6 (5); высота барьера – 0,4 эВ

этих структур коэффициент прохождения составлял более 95 %. Кроме того, при всех конфигурациях барьера гетероперехода наблюдалось резонансное туннелирование с пиками резонанса в 10 % и выше.

На рис. 4 представлены примеры зависимостей максимального значения коэффициента прохождения от внешнего напряжения при вариации ширины барьера (от 6 до 11 нм) и фиксированной его высоте (0,4 эВ). При уменьшении ширины барьера высота пиков растет; при этом изменяется вид зависимости: от убывающей при максимальной ширине до возрастающей (вплоть до значения коэффициента прохождения свыше 90 %).

В ходе исследования выбранных моделей резонансно-туннельных структур было установлено, что значение коэффициента прохождения зависит в большей степени от высоты барьера гетероперехода, чем от его ширины. Поскольку анализ только коэффициентов прохождения не может дать полной картины оптимизации, хотя и играет значительную роль, так как значения этих коэффициентов определяют расчетное поведение ВАХ резонансно-туннельного диода (см. формулу (1)), нами были допол-

нительно рассчитаны ВАХ данных структур при двух температурах: 100 и 300 К.

На рис. 5 показаны ВАХ резонансно-туннельной структуры с высотой барьера гетероперехода 0,3 эВ и толщиной 6 нм – именно при этих параметрах наблюдается наиболее высокий и широкий пик тока. Расчетные ВАХ получены при 100 и 300 К.

Как видно из зависимостей, при 300 К пик плотности тока достигает приемлемой для экспериментального наблюдения величины (до 10^8 А/м²). Для исследуемых резонансно-туннельных структур при ненулевых температурах плотность тока будет иметь две составляющие: тепловую и туннельную. Туннельный ток рассмотрен выше, а тепловой ток выражается с помощью следующей формулы:

$$j_{therm} = ne \left(\frac{k_B T}{2\pi m^*} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{e\phi}{k_B T} \right) \times \left(\exp \left(\frac{eV}{k_B T} \right) - 1 \right). \quad (16)$$

В итоге искомая плотность тока J выражается суммой

$$J = j_{therm} + j_{tunnel}, \quad (17)$$

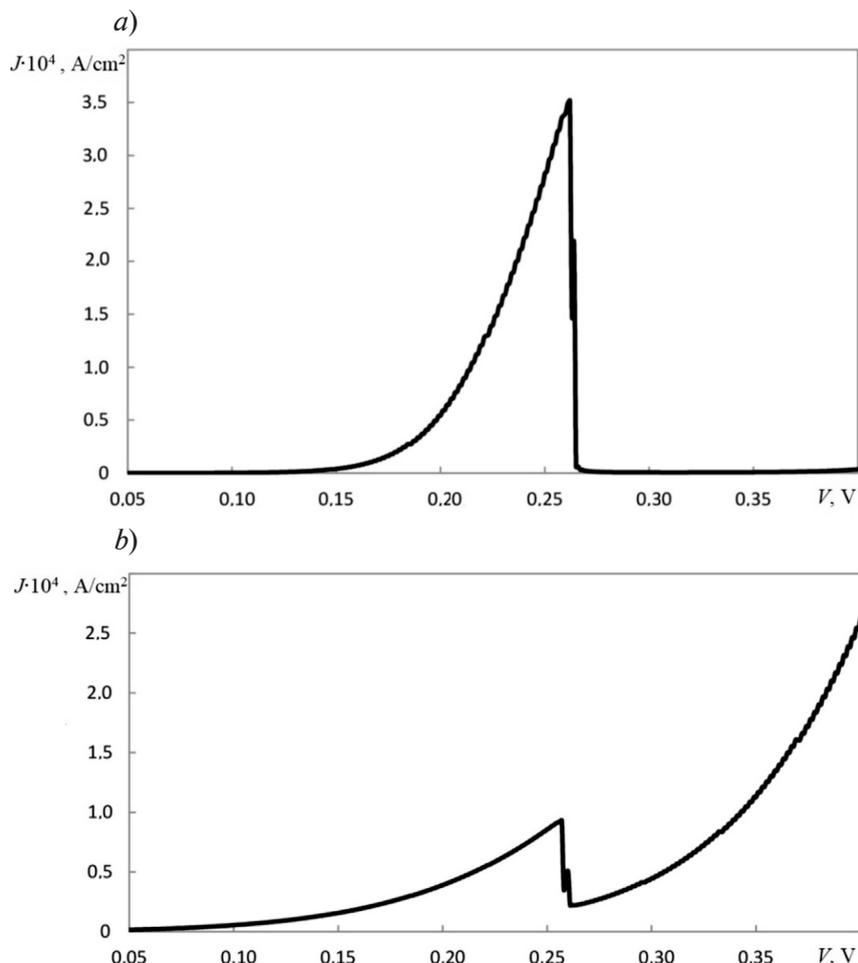


Рис. 5. ВАХ резонансно-туннельной структуры с шириной барьера гетероперехода 6 нм и высотой 0,3 эВ при температурах 100 К (а) и 300 К (б)

где j_{tunnel} — плотность туннельного тока (1).

Вследствие высокого барьера Шоттки ($\phi = 0,8$ эВ) тепловой ток, инжектирующийся через него, оказывается крайне малым, по сравнению с туннельным. Величина тепловой составляющей при комнатной температуре (300 К) на два порядка ниже туннельной.

ВАХ, приведенные на рис. 5, получены без учета эффектов рассеяния электронов. При этом основной вклад в ток дает резонансное туннелирование через второй уровень (см. рис. 3), для которого пик коэффициента прохождения существенно шире и выше.

Однако в легированном арсениде галлия рассеяние электронов может суще-

ственно повлиять на значения коэффициента прохождения и тока. Оценить это влияние можно, приняв, что пик коэффициента прохождения описывается формулой Лоренца [11]:

$$D(E) = \frac{4D_1D_2}{(D_1 + D_2)^2} \frac{\Delta E_b^2}{\Delta E_t^2 + 4(E - E_p)^2}, \quad (18)$$

где D_1 , D_2 — коэффициенты прохождения через первый и второй барьеры; ΔE_t — полная ширина пика; ΔE_b — ширина пика без учета процессов рассеяния, E_p — положение максимального значения пика.

Полная ширина пика

$$\Delta E_t = \Delta E_b + \Delta E_r,$$

где ΔE_r — ширина пика, обусловленная

процессами релаксации; $\Delta E_r = \hbar / \tau_r$ (τ_r — время релаксации импульса).

Для второго резонансного уровня (см. рис. 3) $\Delta E_b \approx 4$ мэВ. Если принять, что в легированном арсениде галлия при 300 К подвижность электронов $\mu = 0,4$ м²/(В·с), то $\tau_r = 1,5 \cdot 10^{-13}$ с, $\Delta E_r = 4,4$ мэВ.

Таким образом, влияние процессов рассеяния выражается в уменьшении высоты пика коэффициента прохождения в 4,4 раза и в его уширении в 2,1 раза. Это должно приводить к существенному снижению туннельного тока (ток должен снижаться ввиду уменьшения высоты резонансного пика, но это снижение должно отчасти компенсироваться его уширением).

Для оценки влияния рассеяния на отрицательную дифференциальную проводимость (ОДП) можно принять, что ее максимальное значение g_{\max} пропорционально отношению $\Delta E_b^2 / \Delta E_r^2$, и тогда g_{\max} уменьшится в 4,4 раза.

Приведенные оценки показывают, что влияние рассеяния в рассмотренной структуре уменьшит пиковое значение тока на ВАХ в несколько раз и растянет область ОДП, делая спад тока более пологим по сравнению с ВАХ на рис 5.

Однако для практического применения остается важным наличие ОДП при нормальной температуре и упрощение технологии, по сравнению с двухбарьерной гетероструктурой.

Заключение

В данной статье представлены результаты компьютерного моделирования перспективных резонансно-туннельных структур. Показано, что туннельные эффекты в этих структурах сохраняются при высоких температурах вплоть до комнатной, а положение и форма пика плотности тока меняются с изменением конфигурации — высоты и ширины барьера GaAs/AlGaAs резонансно-туннельной структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иогансен Л.В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 2. С. 207–213.
2. Иогансен Л.В. О резонансном туннелировании электронов в кристаллах // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. № 2. С. 270–277.
3. Иогансен Л.В. Тонкопленочные электронные интерферометры // Успехи физических наук. 1965. Т. 86. Вып. 5. С. 175–179.
4. Chang L.L., Esaki L., Tsu R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers // Appl. Physics Letters. 1974. Vol. 24. No. 12. Pp. 593–595.
5. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 281 с.
6. Бузанева Е.В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990. 304 с.
7. Cahoy M., McLennan M., Datta S., Lundstrom M.S. Importance of space-charge effects in resonant tunneling devices // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 50. No. 10. Pp. 612–614.
8. Irsigler R., Geppert R., Goppert R., Ludwig J., Rogalla M., Runge K., Schmidt Th., Weber M. Influence of contacts and substrate on semi-insulating GaAs detectors // Nucl. Instrum. Meth. Phys. A. 1997. Vol. 395. No. 1. Pp. 71–75.
9. Сатанин А.М. Численные методы в нанofизике. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2006. 96 с.
10. На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. М.: Мир, 1982. 296 с.
11. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Изд-во «Логос», 2000, 246 с.

Статья поступила в редакцию 18.06.2016, принята к публикации 24.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АБРОСИМОВ Александр Сергеевич — аспирант кафедры электроники твердого тела Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Российская Федерация.

603950, Российская Федерация, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
MANOWAR89@mail.ru

АГАРЕВ Владимир Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры электроники твердого тела Нижегородского государственного университета им Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Российская Федерация.

603950, Российская Федерация, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
agarev_v_n@mail.ru

REFERENCES

- [1] **L.V. Iogansen**, The possibility of resonance transmission of electrons in crystals through a system of barriers, JETP. 18 (1) (1964) 146–150.
- [2] **L.V. Iogansen**, Resonance tunneling of electrons in crystals, JETP. 20 (1) (1965) 180–185.
- [3] **L.V. Iogansen**, Thin-film electron interferometers, Physics-Uspekhi. 8 (3) (1965) 413–416.
- [4] **L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu**, Resonant tunneling in semiconductor double barriers, Appl. Phys. Lett. 24 (12) (1974) 593–595.
- [5] **V.P. Dragunov, I.G. Neizvestnyy, V.A. Gridchin**, Osnovy nanoelektroniki [Nanoelectronics fundamentals], Novosibirsk: Izd-vo NGTU, 2000.
- [6] **E.V. Buzaneva**, Mikrostruktury integralnoy elektroniki [Microstructures of integrated electronics], Moscow, Radio i svyaz, 1990.
- [7] **M. Cahoy, M. McLennan, S. Datta, M.S. Lundstrom**, Importance of space-charge effects in resonant tunneling devices, Appl. Phys. Lett. 50 (10) (1987) 612–614.
- [8] **R. Irsigler, R. Geppert, R. Goppert, J. Ludwig, M. Rogalla, K. Runge, Th. Schmidt, M. Weber**, Influence of contacts and substrate on semi-insulating GaAs detectors, Nucl. Instrum. Meth. Phys. A. 395 (1) (1997) 71–75.
- [9] **A.M. Satanin**, Chislennyye metody v nanofizike [Numerical methods in nanophysics], Nizhni Novgorod, Izd-vo Nizhegorodskogo gosuniversiteta, 2006.
- [10] **T.Y. Na**, Computational methods in engineering boundary value problems, New York, London, Academic Press, 1979.
- [11] **V.Ya. Demikhovskiy, G.A. Vugalter**, Fizika kvantovykh nizkorazmernykh struktur [Physics of quantum low-dimensional structures], Moscow, Logos, 2000.

Received 18.06.2016, accepted 24.10.2017.

THE AUTHORS

ABROSIMOV Alexander S.

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod
23, Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russian Federation
MANOWAR89@mail.ru

AGAREV Vladimir N.

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod
23, Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russian Federation
agarev_v_n@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.111102

UDC 538.91

PROPERTIES OF THE SEMICONDUCTOR STRUCTURE WITH A $p-n$ -JUNCTION CREATED IN A POROUS SILICON FILM UNDER LASER RADIATION

V.V. Tregulov¹, V.A. Stepanov¹, N.N. Melnik²

¹Ryazan State University named for S.A. Yesenin, Ryazan, Russian Federation;

²Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Science, Moscow, Russian Federation

The possibility of formation of a $p-n$ -junction in a film of porous silicon by means of pulse laser radiation have been shown. Methods of Raman spectroscopy and photoluminescence spectroscopy were used to investigate features of transformation of a microstructure of a film of porous silicon under the influence of laser radiation. It was established that influence of a single laser impulse lasting 18 ns with the wavelength of 355 nanometers and energy of an impulse in the range of 85 – 200 mJ lead to disappearance of an amorphized phase and an increase in the sizes of crystallites in a film of porous silicon. In the paper it was shown that the $p-n$ -junction was formed under the influence of laser radiation inside the largest silicon crystallites of a porous silicon film. To study the features of the electrophysical characteristics of the obtained semiconductor structure, methods for measuring the current-voltage and the capacitance-voltage characteristics were used. The obtained $p-n$ -junction was sharp. The mechanisms of current flow had a complex character and were mainly determined by the processes of generation and recombination of carriers in the space-charge region of the $p-n$ -junction involving the energy levels of the traps.

Key words: porous silicon film; $p-n$ -junction, laser radiation; Raman scattering; photoluminescence

Citation: V.V. Tregulov, V.A. Stepanov, N.N. Melnik, Properties of the semiconductor structure with a $p-n$ -junction created in a porous silicon film under laser radiation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 18 – 25. DOI: 10.18721/JPM.11102

СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ С $p-n$ -ПЕРЕХОДОМ, СФОРМИРОВАННЫМ В ПЛЕНКЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.В. Трегулов¹, В.А. Степанов¹, Н.Н. Мельник²

¹Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина,

г. Рязань, Российская Федерация;

²Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,

Москва, Российская Федерация

Показана возможность формирования $p-n$ -перехода в пленке пористого кремния с помощью импульсного лазерного излучения. Методами спектроскопии комбинационного рассеяния света и фотолюминесценции исследованы особенности трансформации микроструктуры пленки пористого кремния под действием лазерного излучения. Установлено, что воздействие одиночного лазерного импульса длительностью 18 нс с длиной волны 355 нм и энергией импульса в диапазоне 85 – 200 мДж приводит к исчезновению аморфизированной фазы и увеличению размеров кристаллитов внутри пленки пористого кремния. В статье показано, что $p-n$ -переход формируется под действием излучения

лазера внутри наиболее крупных кремниевых кристаллитов пленки пористого кремния. Для изучения особенностей электрофизических характеристик полученной полупроводниковой структуры применялись методы измерения вольт-амперных и вольт-фарадных характеристик. Полученный $p-n$ -переход является резким. Механизмы токопрохождения имеют сложный характер и в основном определяются процессами генерации и рекомбинации носителей в области пространственного заряда $p-n$ -перехода с участием энергетических уровней ловушек.

Ключевые слова: пористый кремний; $p-n$ -переход; лазерное излучение; комбинационное рассеяние света; фотолюминесценция

Ссылка при цитировании: Трегулов В.В., Степанов В.А., Мельник Н.Н. Свойства полупроводниковой структуры с $p-n$ -переходом, сформированной в пленке пористого кремния под действием лазерного излучения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 18 – 25. DOI: 10.18721/JPM.11102

Introduction

Silicon photo diodes with nanosecond speed can be created on the basis of a heterojunction between a por-Si film and a single crystal [2]. Currently, developing methods for fabricating semiconductor structures with por-Si films for improving the technical and economic characteristics of semiconductor devices created on the basis of these films is an important problem.

Some properties of a semiconductor structure with a $p-n$ -junction created in a por-Si film under laser radiation have been investigated in this study. This film contained phosphorus impurity. The por-Si film was saturated by phosphorus during its growth [3]. This method allows reducing the number of technological operations in comparison with the traditional technological scheme [1], and decreases the prime cost of the end products which is very important for production of photo-electric converters of solar energy. Using a laser beam scanning on a substrate surface, it is possible to form a $p-n$ -junction with a rather complex topology without resorting to photolithography. It should be noted that the possibility of forming a $p-n$ -junction in silicon under laser radiation was shown in the monograph [4].

Experimental samples

The semiconductor structure was made as follows. A por-Si film was grown on the surface of a silicon single-crystal plate of p -type with a specific resistance of 1 Ohm·cm and a (100) orientation of the surface. The anode electrochemical etching method was used

in galvanostatic mode at a current density of 20 mA/cm² for 10 min. An electrolyte consisting of HF, C₂H₅OH and H₃PO₄ (1 : 1 : 1 ratio) was applied. The resulting por-Si film contained phosphorus impurity. The electrolyte was then washed off the film surface and the samples were dried.

The surface of the prepared por-Si film was exposed to polyharmonic emission by an LS-2147A (Nd:YAG) laser. Ablation of samples was carried out by a single 18 ns pulse at a wavelength of 532 nm with the energy ranging from 100 to 240 mJ and at that of 355 nm with the energy ranging from 60 to 200 mJ.

In order to measure the electrophysical characteristics, indium ohmic contacts were soldered to the por-Si film irradiated, and to the back surface of the sample. Before forming the ohmic contacts, short-term etching of the samples under investigation was carried out in the water HF solution (10 %) to remove the superficial oxidized por-Si layer. The samples intended for optical measurements were not subjected to such etching.

Experimental results and discussion

The superficial thermo-electromotive force (thermo-emf) measurement after the partial removal of a por-Si layer showed n -conductivity of the samples exposed to laser radiation of their surface with $\lambda = 355$ nm and an energy of 85 – 200 mJ and p -conductivity of the samples exposed to laser radiation with $\lambda = 532$ nm. Thus, in the first case a $p-n$ -junction was formed. Because of this, further studies were carried out with the samples

irradiated by the laser wavelength of 355 nm.

The etching in the water HF solution for 1 h led to the removal of the *n*-type layer. Therefore, the *p-n*-junction formed in the largest silicon crystallites of the por-Si film.

In order to investigate the microstructure features of the por-Si film, Raman scattering (RS) and photoluminescence (PL) were used for the samples irradiated by the laser wavelength of 355 nm with the impulse energy of 85 mJ and 200 mJ and for the unirradiated samples.

RS and PL in the por-Si film were excited by the argon laser emission with a wavelength of 488 nm. Excitation spectra were recorded using an U-1000 spectrometer (Jobin Ivon) in standard geometry, i.e., when the laser beam and the reflected one of diffused light were directed along a normal to the sample's surface.

RS spectra of the por-Si films for the samples irradiated and unirradiated by laser emission are shown in Fig. 1. For comparison, the figure also shows the spectrum of single-crystal silicon which was used as a substrate for preparation of the samples under consideration.

The first-order RS spectral line for the por-Si film which was not subjected to radiation has considerable broadening and is noticeably shifted to the low-frequency region relative

to the frequency of 521 cm⁻¹ in comparison with the spectrum of single-crystal silicon (Fig. 1). It can be attributed to the effect of spatial restriction of phonons in ensembles of silicon crystallites with sizes of several nanometers [5, 6]. The considered RS curve also exhibits a wide band in the region of 480 cm⁻¹ specific to the existence of an amorphous phase in por-Si films [5].

The average diameter of silicon crystallites in por-Si film before laser irradiation is 2.2 nm; it is estimated by the shift value and the broadening of the RS spectral line of the first order according to the technique presented in Ref. [6].

Laser irradiation at the wavelength of 355 nm with the energy of 85–200 mJ causes the sharp narrowing of the first-order RS line in the spectrum of the por-Si film and a decrease in the shift relative to the frequency of 521 cm⁻¹ (see Fig. 1). The average diameters of silicon crystallites in por-Si film estimated according to technique [6] are 9.5 nm for the sample irradiated with the impulse energy of 85 mJ and 17.0 nm for that irradiated with 200 mJ. It follows from the analysis of RS spectra (see Fig.1) that ablation of the por-Si film by the laser leads to disappearance of a wide spectral band in the region of 480 cm⁻¹.

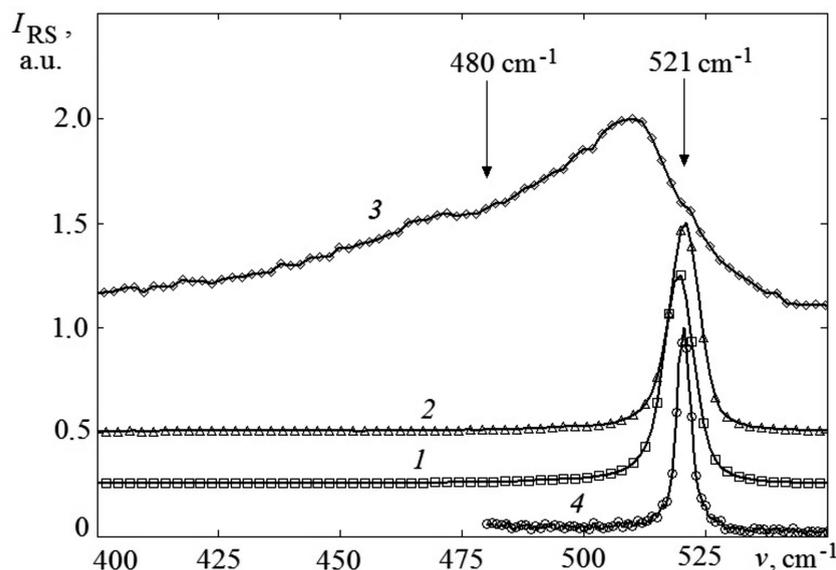


Fig. 1. RS spectra for por-Si films: exposed to laser radiation at a wavelength of 355 nm (1, 2) with $E = 85$ mJ (1) and 200 mJ (2); the spectra for unirradiated (3) and for single-crystal silicon (4) samples are added for comparison

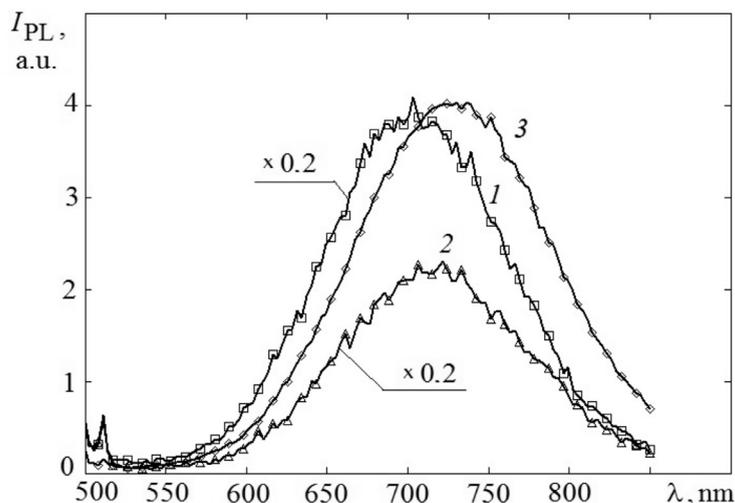


Fig. 2. PL spectra for por-Si films: exposed to laser radiation at a wavelength of 355 nm (1, 2) with $E = 85$ mJ (1) and 200 mJ (2); unirradiated (3)

The form of PL spectra for the samples laser-irradiated and unirradiated is typical for por-Si films (Fig. 2).

Laser radiation of a por-Si film's surface led to an essential decrease in PL intensity (Fig. 2) compared with the state of the initial sample. Besides, there was no correlation between the sizes of silicon crystallites and the peak positions in PL spectra determined by the quantum-dimensional effect in the por-Si film. The maxima of spectral lines for samples with large sizes of silicon crystallites had to shift considerably to the long-wave region, however, it was not observed in our experiments. According to Ref. [7], a similar situation can take place in por-Si films when radiation-recombination processes considerably affect the superficial states of silicon crystallites. The decrease in PL intensity with laser energy growth can be connected with an increase in the concentration of defects on the surfaces of silicon crystallites which are the centers of nonradiative recombination.

To study the electrophysical processes in the investigated semiconductor structure with the $p-n$ -junction, the current-voltage and the capacitance-voltage characteristics were measured at room temperature.

The above-mentioned curves for the samples obtained under irradiation at energies ranging from $E = 85 - 200$ mJ were identical in character. Because of this, only

the characteristics of the sample obtained at $E = 85$ mJ are discussed further. Measurements were taken by means of E7-20 digital measuring instrument. When measuring current-voltage and capacitance-voltage characteristics a negative voltage application to the por-Si at the contact corresponds to the forward bias.

Direct branches of the current-voltage curves on a double logarithmic scale (Fig. 3, *a*) can be divided into three regions of approximately linear dependences which can be presented by the power relationship

$$I \sim U^m \quad (1)$$

where I is the current, U is the voltage shift, m is the exponent characterizing an inclination of the respective straight line [8]. Such a dependence is used describing the current flow mechanisms within the model of space-charge-limited currents (SCL).

The known expression for a $p-n$ -junction holds for the first part of the direct branch of the current-voltage curve:

$$I \sim \exp(qU/nkT), \quad (2)$$

where q is the elementary charge; n is the non-ideality factor, k is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature [9].

The value of the factor n is 1.7, therefore, the current flow corresponding to this part of the current-voltage characteristic is determined by recombination of carriers in the space charge

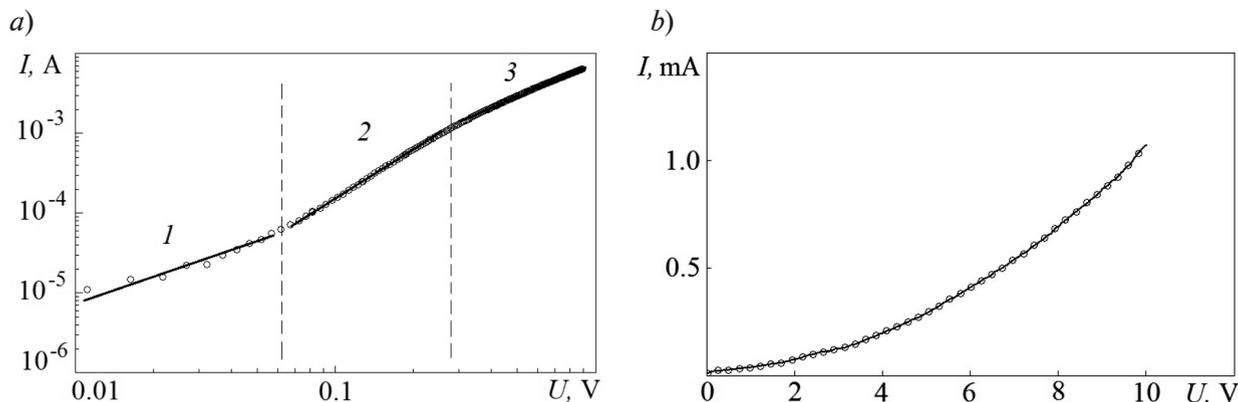


Fig. 3. Current-voltage characteristics of por-Si films at direct (a) and reverse (b) biases; the parts of the curve are numbered 1 to 3 for discussion

region of the $p-n$ -junction.

The second part of the direct branch of the current-voltage characteristic is described by expression (1) and is explained within the SCL model by the trap square law as $m = 2$ [8]. In the third part of the curve (Fig. 3), the condition $1 < m < 2$ holds. Within the framework of the SCL model, this behavior can be explained by the depletion of the traps' level whose recharge is determined by the process expressed by the second part of the curve. On the other hand, the third part of the straight branch of the current-voltage characteristic can be explained by the tunneling of charge carriers inside the por-Si layer between the traps' levels on the silicon crystallites surface through the SiO_x barriers. Such mechanism of the current flow for the forward bias, according to Ref. [10], can take

place in structures with a $p-n$ -junction and por-Si film.

As for the reverse bias, the current-voltage characteristic has the form typical for the so-called "soft" breakdown (Fig. 3, b). This is usually explained by an avalanche breakdown involving a sufficiently large number of defects with deep energy levels [9].

The capacitance-voltage characteristic of the structure under study is shown in Fig. 4. It was measured in the frequency range between 1 kHz and 1 MHz. An increase in capacitance with decreasing frequency for forward and reverse biases indicates the presence of traps with deep energy levels and surface states on silicon crystallites in the por-Si film in the p -region of the semiconductor structure under study.

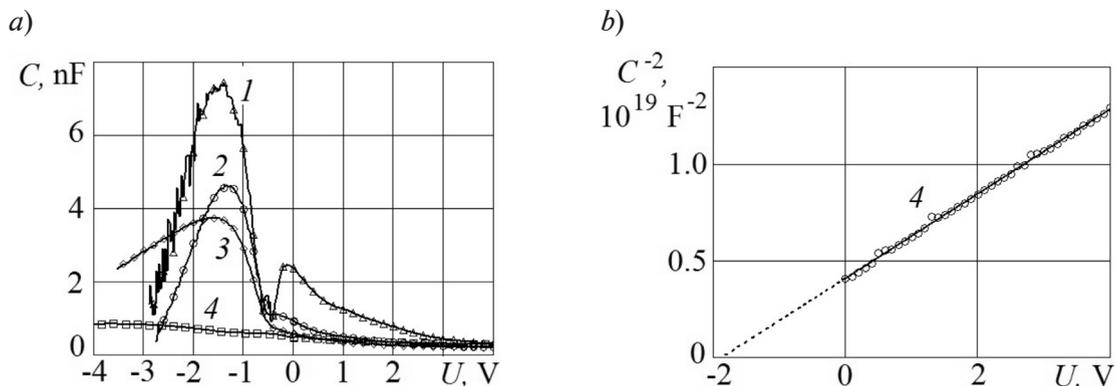


Fig. 4. Capacitance-voltage characteristics at various frequencies f of the measuring signal (a) and one of them in the coordinates of C^{-2}, U (b); f , kHz: 1 (1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4)



The high-frequency capacitance-voltage characteristic (1 MHz) in the region of positive values of U , represented in $C^{-2}(U)$ coordinates, is linear (Fig. 4, *b*); hence, the p - n -junction is sharp. A sufficiently large value of the diffusion potential of the p - n -junction (1.87 V), determined from the characteristic in Fig. 4, *b*, can be explained by the effect of an incompletely removed por-Si surface layer oxidized as a result of laser radiation during the formation of the p - n -junction. The impurity concentration in the base region of the p - n -junction, determined from the slope of the characteristic in Fig. 4, *b*, was $1.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. This value practically coincides with that of the acceptor impurity in the initial silicon p -type plate on which the por-Si film was formed.

Summary

Thus, irradiation of a por-Si film containing a phosphorus impurity with a single 18 ns laser pulse at $\lambda = 355 \text{ nm}$ and with $E = 85 - 200 \text{ mJ}$ results in the formation of a p - n -junction within the largest silicon crystallites. As a result of laser irradiation, the microstructure of

the por-Si film undergoes significant changes: its amorphized phase disappears, and only the largest silicon crystallites remain. Furthermore, as the energy of the laser pulse increases, the silicon crystallites grow in size. Simultaneously, surface states are forming on the surfaces of the crystallites which are the centers of nonradiative recombination.

Perhaps, a partial recrystallization of the por-Si film occurs as a result of laser radiation. The resulting p - n -junction is sharp. The mechanisms of current flow are complex in nature and are mainly determined by the processes of recombination and charge carrier generation involving deep energy levels in the space charge region.

The obtained results can be useful in the engineering of optical sensors and photovoltaic solar energy converters.

The work was supported by Ministry of Education and Science of Russian Federation (grant 3.9506.2017/ВСН).

Работа выполнена по государственному заданию Минобрнауки Российской Федерации (грант № 3.9506.2017/БЧ).

REFERENCES

- [1] **T. Dzhafarov**, Porous silicon and solar cells, In: L. Canham (Ed.), Handbook of Porous Silicon, Springer International Publishing, Switzerland (2014) 501–511.
- [2] **J.P. Zheng, K.L. Jiao, W.P. Shen**, Highly sensitive photodetector using porous silicon, Appl. Phys. Lett. 61 (4) (1992) 459–461.
- [3] **N.N. Melnik, V.V. Tregulov, A.A. Krivushin**, Svoystva n^+-p -perekhoda, sformirovannogo termicheskoy diffuziey v plenke poristogo kremniya [Properties of n^+-p -junction formed by thermal diffusion in a porous silicon film], Sbornik trudov VI Vserossiyskoy molodezhnoy konferentsii po fundamentalnyim i innovatsionnyim voprosam sovremennoy fiziki, Moscow, FIAN (2015) 155.
- [4] **T.D. Dzhafarov**, Fotostimulirovannyye atomnyie protsessy v poluprovodnikah [Photo-stimulated atomic processes in semiconductors], Energoatomizdat, Moscow, 1984.
- [5] **W.J. Salcedo, F.R. Fernandez, J.C. Rubimc**, Influence of laser excitation on Raman and photoluminescence spectra and FTIR study of porous silicon layers, Brazilian Journal of Physics. 29 (4) (1999) 751–755.
- [6] **M. Yang, D. Huang, P. Hao**, Study of the Raman peak shift and the linewidth of light-emitting porous silicon, J. Appl. Phys. 75 (1) (1994) 651–653.
- [7] **N.N. Melnik, V.V. Tregulov**, Photoluminescence and Raman studies of the structure of a thick porous silicon film, Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 42 (3) (2015) 77–80.
- [8] **M.A. Lampert, P. Mark**, Current injection in solids, Academic Press, New York and London, 1970.
- [9] **S.M. Sze**, Physics of semiconductor devices, Second edition, A Wiley-Interscience Publication John Wiley & Sons, 1981.
- [10] **V.V. Tregulov, V.A. Stepanov, V.G. Litvinov, A.V. Ermachikhin**, Specific features of current flow mechanisms in the semiconductor structure of a photoelectric converter with an n^+-p -junction and an antireflective porous silicon film, Technical Physics. 61 (11) (2016) 1694–1697.

Received 03.10.2017, accepted 18.10.2017.

THE AUTHORS

TREGULOV Vadim V.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
40 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation.
trww@yandex.ru

STEPANOV Vladimir A.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
40 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation.
stepanov@physicist.net

MELNIK Nikolay N.

Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Science
53 Leninsky Ave., Moscow, 119991, Russian Federation.
melnik@lebedev.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Dzhafarov T.**, Porous silicon and solar cells // Handbook of Porous Silicon. L. Canham (Ed.). Switzerland: Springer International Publishing, 2014. Pp. 501–511.
2. **Zheng J.P., Jiao K.L., Shen W.P.** Highly sensitive photodetector using porous silicon // Appl. Phys. Lett. 1992. Vol. 61. No. 4. Pp. 459–461.
3. **Мельник Н.Н., Трегулов В.В., Кривушин А.А.** Свойства n^+-p -перехода, сформированного термической диффузией в пленке пористого кремния // Сборник трудов VI Всероссийской молодежной конференции по фундаментальным инновационным вопросам современной физики. М: ФИАН, 2015. С. 155.
4. **Джафаров Т.Д.** Фотостимулированные атомные процессы в полупроводниках. М.: Энергоатомиздат, 1984. 133 с.
5. **Salcedo W.J., Fernandez F.R., Rubimc J.C.** Influence of laser excitation on Raman and photoluminescence spectra, and FTIR study of porous silicon layers // Brazilian Journal of Physics. 1999. Vol. 29. No. 4. Pp. 751–755.
6. **Yang M., Huang D., Hao P.** Study of the Raman peak shift and the linewidth of light-emitting porous silicon // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 75. No. 1. Pp. 651–653.
7. **Melnik N.N., Tregulov V.V.** Photoluminescence and Raman studies of the structure of a thick porous silicon film // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 2015. Vol. 42. No. 3. Pp. 77–80.
8. **Lampert M.A., Mark P.** Current injection in solids. New York, London: Academic Press, 1970. 351 p.
9. **Sze S.M.** Physics of semiconductor devices. 2nd ed. Wiley-Interscience Publication. John Wiley & Sons, 1981. 868 p.
10. **Tregulov V.V., Stepanov V.A., Litvinov V.G., Ermachikhin A.V.** Specific features of current flow mechanisms in the semiconductor structure of a photoelectric converter with an n^+-p -junction and an antireflective porous silicon film // Technical Physics. 2016. Vol. 61. No. 11. Pp. 1694–1697.

Статья поступила в редакцию 03.10.2017, принята к публикации 18.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТРЕГУЛОВ Вадим Викторович — кандидат технических наук, доцент кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46
trww@yandex.ru

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46
stepanov@physicist.net



МЕЛЬНИК Николай Николаевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Российская Федерация.

119991, Российская Федерация, г. Москва, Ленинский проспект, 53
melnik@lebedev.ru

DOI: 10.18721/JPM.111103

УДК 537.9

ЭЛЕКТРЕТНЫЙ ЭФФЕКТ В БИОРАЗЛАГАЕМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ ПОЛИЛАКТИДА С НАНОРАЗМЕРНЫМ ОКСИДОМ МАГНИЯ В КАЧЕСТВЕ НАПОЛНИТЕЛЯ

**А.П. Платко¹, Ю.И. Сотова¹, Ю.А. Гороховатский¹,
Е.А. Карулина¹, М.Ф. Галиханов²**

¹ Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Российская Федерация

В работе представлены результаты исследования механизмов релаксации заряда в композитных пленках на основе полилактида с наноразмерным гидрофильным наполнителем – оксидом магния методами термостимулированных токов короткого замыкания и термостимулированной релаксации поверхностного потенциала. Установлено оптимальное значение концентрации наполнителя – оксида магния (4 %) в пленках на основе полилактида, обеспечивающее наибольшую стабильность короноэлектретного состояния. По данным термоактивационной спектроскопии, для полимерной матрицы оценены методом слабой регуляризации значения эффективного частотного фактора и энергии активации глубоких ловушек для инжектированного заряда. Полученные результаты свидетельствуют о возможности создания активных (длительное время сохраняющих органолептические свойства продуктов) биоразлагаемых (решающих проблему утилизации) упаковочных материалов на основе полилактида с оксидом магния в качестве наполнителя.

Ключевые слова: полилактид; гидрофильный наполнитель; биоразлагаемая пленка; электретиrowание; заряд-дипольный комплекс; стабильность электретного состояния

Ссылка при цитировании: Платко А.П., Сотова Ю.И., Гороховатский Ю.А., Карулина Е.А., Галиханов М.Ф. Электретный эффект в биоразлагаемых полимерных пленках полилактида с наноразмерным оксидом магния в качестве наполнителя // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 26 – 33. DOI: 10.18721/JPM.111103

ELECTRET EFFECT IN BIODECOMPOSED POLYLACTIDE FILMS FILLED WITH NANOSCALE MAGNESIA

**A.P. Platko¹, Yu.I. Sotova¹, Yu.A. Gorokhovatskiy¹,
E.A. Karulina¹, M.F. Galikhanov²**

¹ Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russian Federation;

² Kazan National Research Technological University, Kazan, Russian Federation

In the paper, the results of studies in the charge relaxation mechanism in polylactide films with nanoscale hydrophilic filler (magnesia) have been obtained using thermally stimulated depolarization current (TSDC) and thermally stimulated surface-potential decay (TSSPD) methods. The loading of the hydrophilic filler (magnesia) was shown to result in the polymer conductance reduction, i. e., in the improvement of the electret properties of the composite. The optimal content of magnesia (4%) responsible for the highest electret state stability in polylactide films was determined. The values

of the effective frequency factor and the activation energy of the deep traps for the injected charge being inherent to the polymer matrix were estimated by regularization technique. The obtained results demonstrate the capability of making active (long time retaining the organoleptic properties of the products) and biodegradable (solving the problem of recycling) packaging materials based on composite polylactide films with magnesia as a filler.

Key words: polylactide; hydrophilous filler; biodecomposed film; electret state; charge-dipole complex

Citation: A.P. Platko, Yu.I. Sotova, Yu.A. Gorokhovatskiy, E.A. Karulina, M.F. Galikhanov, Electret effect in biodecomposed polylactide films filled with nanoscale magnesia, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11(1) (2018) 26 – 33. DOI: 10.18721/JPM.11103

Введение

Синтетические полимеры нашли широкое применение в качестве упаковочного материала для пищевых продуктов. При этом остро встала проблема утилизации этих полимерных материалов после их использования в качестве упаковки (сжигание приводит к выделению ядовитых газов, время разложения в компосте может превышать сотни лет).

Одним из способов решения данной проблемы является использование биоразлагаемых полимеров. На сегодняшний день самым перспективным материалом для этой цели считается полилактид (ПЛА) – полимер, мономер которого (лактид $C_3H_4O_2$) получают из молочной кислоты. Было установлено, что если в полимерной пленке сформировать стабильное электретное состояние, то упаковка из такого материала будет сохранять органолептические свойства продуктов в течение длительного времени [1 – 3]. Такая упаковка получила название активной [4, 5]. Известно, что ПЛА в исходной форме не обладает достаточно высокой стабильностью электретного состояния [6 – 8], однако введение в полимер различных наполнителей, в частности аэросила SiO_2 , позволяет значительно повысить стабильность электретного состояния в пленках на основе ПЛА [9].

Стоит отметить, что производство аэросила является довольно дорогостоящим, что негативно отражается на стоимости продуктов, упакованных в пленки ПЛА с аэросилом-наполнителем. По этой причине представляет интерес исследовать влияние других наполнителей на стабильность электретного

состояния в композитных пленках на основе ПЛА. В данной работе в качестве наполнителя был выбран оксид магния, который, как и аэросил, является гидрофильным наполнителем, однако его производство является более дешевым [10].

Таким образом, цель данного исследования – установить природу электретного состояния в композитных пленках на основе ПЛА с оксидом магния как наполнителя (система ПЛА + MgO).

Экспериментальная часть

В данной работе исследовались пленки ПЛА и ПЛА + MgO , полученные методом прессования по ГОСТ 12019-66 в Казанском национальном исследовательском технологическом университете (КНИТУ). Толщина пленок составляла 100 – 200 мкм, массовая доля оксида магния варьировалась и составляла 0, 2, 4 и 8 %.

Электретное состояние в исследуемых пленках достигалось путем выдерживания пленки в поле положительного или отрицательного коронного разряда в течение 5 мин при комнатной температуре. Стабильность и природа электретного состояния исследовались методами термостимулированных токов короткого замыкания (ТСТ КЗ) и термостимулированной релаксации поверхностного потенциала (ТСРПП).

Метод ТСРПП основан на регистрации температурной зависимости значения поверхностного потенциала предварительно электретированных образцов при линейном нагревании. Метод ТСТ КЗ основан на измерении тока короткого замыкания в предварительно электретированном образ-

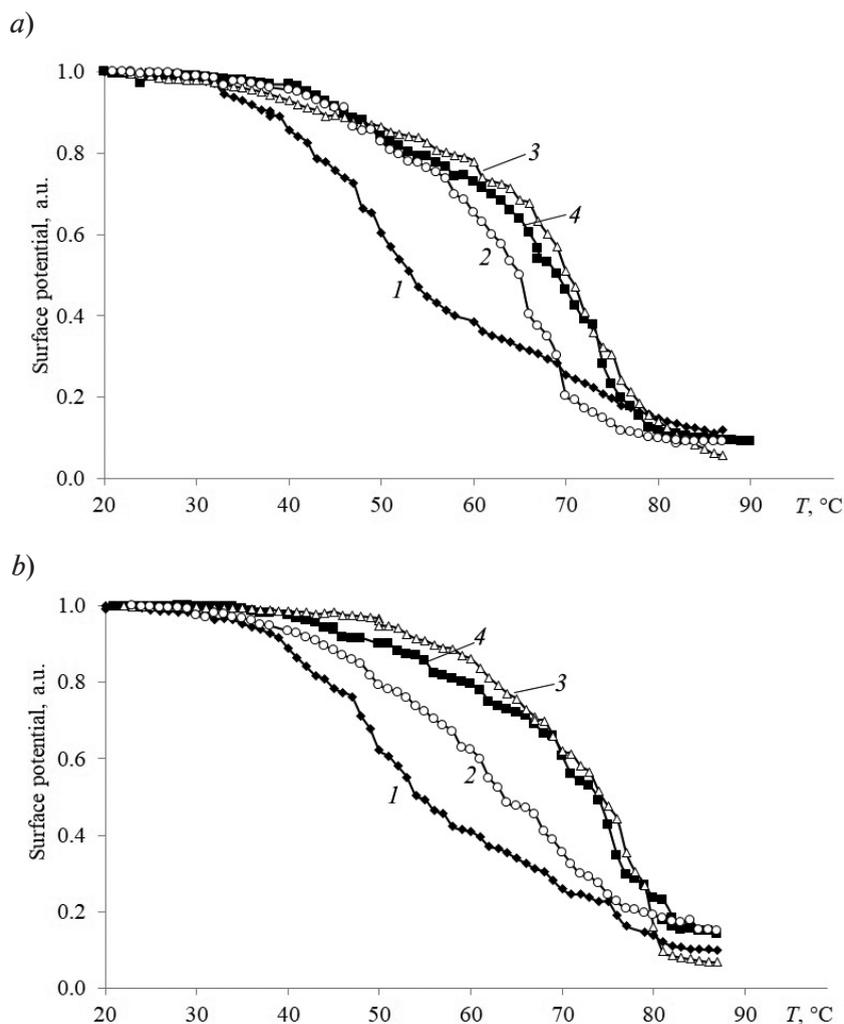


Рис. 1. Кривые ТСРПП пленок на основе исходного ПЛА (1) и ПЛА с наполнителем (оксид магния) (2 – 4) для случаев отрицательной (а) и положительной (б) полярностей коронирующего электрода. Концентрация MgO, %: 2 (2), 4 (3), 8 (4)

це также при линейном нагревании.

На рис. 1 представлены графики температурных зависимостей ТСРПП для пленок на основе исходного ПЛА и ПЛА + MgO с различным содержанием наполнителя в случае предварительного электретирирования в отрицательной и положительной коронах.

Из полученных зависимостей видно, что при внесении наполнителя MgO стабильность электретного состояния в композитных пленках ПЛА увеличивается и достигает своего максимума при массовой доле MgO 4 % (кривые 3 на рис. 1). Дальнейшее увеличение концентрации наполнителя

приводит к снижению стабильности электретного состояния в композитных пленках на основе ПЛА с гидрофильным наноразмерным наполнителем MgO (рис. 2). Температурная стабильность электретного состояния оценивалась путем обработки кривых ТСРПП (см. рис. 1) – определялись температурные точки их перегиба.

Для наглядности на рис. 3 представлено отдельное сравнение графиков ТСРПП для композитных пленок ПЛА + 4 % MgO, электретирированных при различных полярностях коронирующих электродов.

Видно, что характер спада потенциала зависит от знака полярности коронирующей

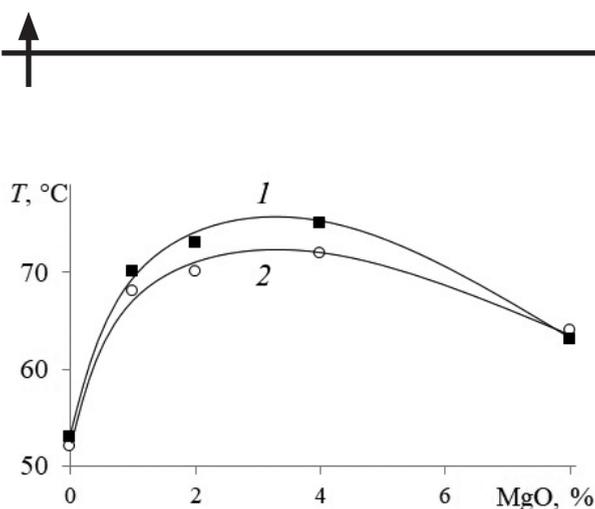


Рис. 2. Зависимости температурной стабильности электретного состояния (температура точки перегиба кривой ТСРПП) от процентного содержания наполнителя MgO в композитных пленках ПЛА; получены при положительной (1) и отрицательной (2) полярностях коронирующего электрода

щего электрода: при положительной полярности наблюдается более высокая стабильность электретного состояния, чем при отрицательной. Это говорит о том, что спад поверхностного потенциала определяется высвобождением захваченного при электретировании заряда из приповерхностных ловушек. Видно, что энергетическая глубина ловушек для положительных носителей заряда больше, чем для отрицательных.

Увеличение стабильности электретного

состояния с внесением наполнителя объясняется наличием в полимере так называемых заряд-дипольных центров. Последние образуются в результате взаимодействия молекул воды с цепями полимера, которые, с одной стороны, обладают дипольным моментом (т. е. способны участвовать в дипольной поляризации), а с другой стороны, служат центрами захвата для носителей заряда (и тем самым определяют объемную проводимость пленки) [11]. Поскольку оксид магния представляет собой гидрофильный наполнитель, он способен захватывать часть молекул воды, приводя тем самым к снижению концентрации заряд-дипольных центров в композитных пленках ПЛА, по сравнению с исходным ПЛА (без наполнителя), и, как следствие, к уменьшению проводимости и, соответственно, к увеличению стабильности электретного состояния.

Немонотонную зависимость температурной стабильности электретного состояния композитных пленок полилактида от процентного содержания наноразмерного гидрофильного наполнителя MgO можно объяснить наличием двух конкурирующих механизмов объемной проводимости. С одной стороны, как уже упоминалось выше, при увеличении концентрации наполнителя за счет уменьшения концентрации заряд-дипольных центров объемная

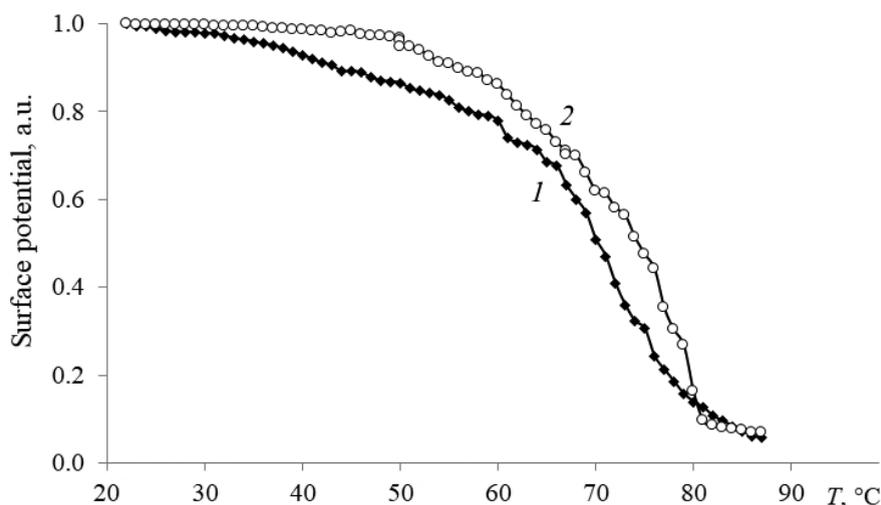


Рис. 3. Кривые ТСРПП композитных пленок ПЛА + 4% MgO, полученные при отрицательной (1) и положительной (2) полярностях коронирующего электрода

проводимость уменьшается, а значит, стабильность электретоного состояния должна возрастать, с другой — из-за роста вероятности образования проводящих кластеров по частицам наполнителя объемная проводимость может увеличиваться, что, соответственно, должно приводить к уменьшению стабильности электретоного состояния. Таким образом, должно существовать оптимальное значение концентрации наполнителя MgO в пленках на основе ПЛА, обеспечивающее наибольшую стабильность электретоного состояния в пленках. В нашем случае оптимальное значение концентрации составляет 4 %.

На рис. 4 приведены кривые ТСТ КЗ в композитных пленках ПЛА + 4 % MgO, предварительно электретоированных в положительном и отрицательном коронных разрядах.

Видно, что на кривых ТСТ КЗ в композитных пленках на основе ПЛА наблюдается два пика. Низкотемпературный пик в районе 40 °С связан с релаксацией гетерозаряда (в нашей модели — ориентация заряд-дипольных центров). Высота максимума этого пика, если сравнивать с данными по

пленкам исходного ПЛА, оказывается на два порядка меньше [6]. Такой результат согласуется с предположением, что внесение наноразмерного гидрофильного наполнителя MgO понижает концентрацию заряд-дипольных центров (влияние MgO подобно действию аэросила SiO₂, которое описано во введении к работе).

Высокотемпературные пики на кривых ТСТ КЗ в композитных пленках ПЛА соответствуют релаксации гомозаряда. Это позволяет предположить, что указанные пики обусловлены выбросом заряда из глубоких приповерхностных ловушек. Из графиков рис. 4 видно, что глубина (энергия активации) ловушек для отрицательных носителей заряда меньше, чем для положительных. Этот результат согласуется с данными ТСРПП. Рассчитанные значения энергии активации ловушек составили: $W = 0,84 \pm 0,03$ эВ для положительных носителей заряда и $W = 0,76 \pm 0,03$ эВ для отрицательных (частотный фактор в обоих случаях равен 10^{11} с^{-1}). Поскольку температурное положение высокотемпературных пиков в композитных пленках ПЛА + 4 % MgO совпадает с температурным по-

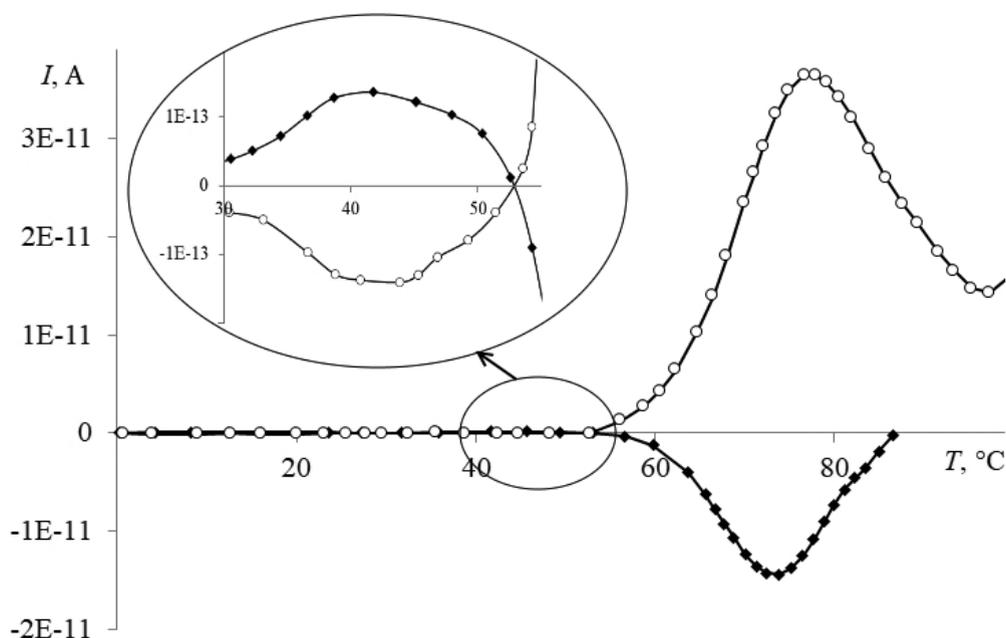


Рис. 4. Кривые ТСТ КЗ в коронноэлектретоированной композитной системе: пленка ПЛА + 4 % MgO; получены при положительной (1) и отрицательной (2) полярностях коронирующего электрода

ложением аналогичных пиков в пленках исходного ПЛА (см. работу [6]), можно сделать вывод о том, что ловушки, определяющие возможную стабильность электретоного состояния, присущи матрице полимера ПЛА.

Полученные результаты ТСТ КЗ в композитных пленках на основе ПЛА и наполнителя MgO подобны ранее исследованным зависимостям ТСТ КЗ в композитных пленках ПЛА с наполнителем аэросилом SiO₂ [6], с той лишь разницей, что оптимальным (с точки зрения стабильности электретоного состояния) значением кон-

центрации наполнителя аэросила являлось 2 %, тогда как для оксида магния это значение составляет 4 %.

Заключение

Гидрофильный наноразмерный наполнитель MgO можно предложить в качестве более дешевой альтернативы наполнителю аэросил SiO₂ для повышения стабильности электретоного состояния в биоразлагаемых композитных пленках на основе ПЛА, используемых для создания активного упаковочного материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галиханов М.Ф., Борисова А.Н., Крыницкая А.Ю., Дебердеев Р.Я. Влияние активного упаковочного материала на качество молока // Известия ВУЗов. Пищевая технология. 2005. № 2 – 3. С. 71–73.
2. Галиханов М.Ф., Борисова А.Н., Дебердеев Р.Я. Активный упаковочный материал для яблок // Вестник Казанского технологического университета. 2004. № 2. С. 163–167.
3. Sodergard A., Stolt M. Industrial production of high molecular weight poly(lactic acid) // Poly(Lactic Acid): Synthesis, Structures, Properties, Processing, and Applications. Ed. by R. Auras, L.T. Lim, S.E.M. Selke, H. Tsuji. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2010.
4. Dainelli D., Gontard N., Spyropoulos D., Zondervan-van den Beuken E., Tobback P. Active and intelligent food packaging: legal aspects and safety concerns // Trends in Food Science & Technology. 2008. Vol. 19. Suppl. 1. November. Pp. S103–S112.
5. Крыницкая А.Ю., Борисова А.Н., Галиханов М.Ф., Сысоева М.А., Гамаюрова В.С. Влияние «активного» упаковочного материала на развитие микроорганизмов в пищевых продуктах // Пищевая промышленность. 2011. № 1. С. 27–29.
6. Гороховатский Ю.А., Галиханов М.Ф., Игнатъева Д.А., Карулина Е.А., Сотова Ю.И. Механизмы релаксации заряда в композитных пленках на основе полиактида // Университетский научный журнал. 2017. № 27. С. 46–55.
7. Guzhova A., Yovcheva T., Viraneva A. Study of polylactic acid corona electrets // Bulgarian Chemical Communications. 2015. Vol. 47. Special Issue B. Pp. 115–120.
8. Guzhova A.A., Galikhanov M.F. Charge depth in polylactic acid electret filled with fine filler // Bulgarian Chemical Communications. 2015. Vol. 47. Special Issue B. Pp. 103–108.
9. Гороховатский Ю.А., Галиханов М.Ф., Игнатъева Д.А., Карулина Е.А., Сотова Ю.И., Темнов Д.Э., Гужова А.А. Пути повышения стабильности электретоного состояния в композитных пленках полилактида // Вестник технологического университета. 2017. Т. 20. № 4. С. 27–30.
10. Хузиахметов Р.Х., Хуснутдинов В.А., Сайфуллин Р.С. Получение активного оксида магния // Postepy Technologii Chemicznej Nieorganicznej: "CHEMTEX-93". Wroclaw. 1993. Pp. 107–114.
11. Гороховатский Ю.А., Анискина Л.Б., Викторovich А.С., Гороховатский И.Ю., Карулина Е.А., Тазенков Б.А., Темнов Д.Э., Чистякова О.В. Проявление спин-орбитального взаимодействия в колебательных спектрах полиэлектролитов – волокнистых и пленочных электретов на основе полипропилена и полиэтилена // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. 2009. № 79. С. 47–61.

Статья поступила в редакцию 18.01.2018, принята к публикации 24.01.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПЛАТКО Анастасия Павловна – студентка факультета физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
stewnstewn@gmail.com

СОТОВА Юлия Ильинична – аспирантка кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
juliasotova1992@mail.ru

ГОРОХОВАТСКИЙ Юрий Андреевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
yurig@fromru.com

КАРУЛИНА Елена Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
karulina@mail.ru

ГАЛИХАНОВ Мансур Флоридович – доктор технических наук, ведущий аналитик Центра переподготовки и повышения квалификации преподавателей вузов Казанского национального исследовательского технологического университета, г. Казань, Российская Федерация.

420015, Российская Федерация, г. Казань, пр. К. Маркса, 68
mgalikhanov@yandex.ru

REFERENCES

- [1] M.F. Galikhanov, A.N. Borisova, A.Yu. Krynitskaya, R.Ya. Deberdeyev, Vliyanie aktivnogo upakovochno materiala na kachestvo moloka [Influence of active packaging material on milk quality], Izvestiya vuzov. Pishchevaya tekhnologiya. (2–3) (2005) 71–73.
- [2] M.F. Galikhanov, A.N. Borisova, R.Ya. Deberdeyev, Aktivniy upakovochniy material dlya yablok [Active packaging material for apples], Herald of Kazan Technological University. (2) (2004) 163–167.
- [3] A. Sodergard, M. Stolt, Industrial production of high molecular weight poly(lactic acid), Poly(Lactic Acid): Synthesis, Structures, Properties, Processing, and Applications, edited by R. Auras, L.T. Lim, S.E.M. Selke, H. Tsuji. Hoboken, John Wiley & Sons, Inc., 2010.
- [4] D. Dainelli, N. Gontard, D. Spyropoulos, et al., Active and intelligent food packaging: legal aspects and safety concerns, Trends in Food Science & Technology. 19, Suppl. 1 (November) (2008) S103–S112.
- [5] A.Yu. Krynitskaya, A.N. Borisova, M.F. Galikhanov, M.A. Sysoeva, V.S. Gamayurova, Vliyanie aktivnogo upakovochno materiala na razvitiye mikroorganizmov v pishchevykh produktakh [Influence of “active” packaging material on the development of microorganisms in foodstuffs], Food industry. (1) (2011) 27–29.
- [6] Yu.A. Gorokhovatskiy, M.F. Galikhanov, D.A. Ignatyeva, et al., Charge relaxation mechanisms in composite films based on polylactide, Humanities and Science University Journal. 27 (2017) 46–55.
- [7] A. Guzhova, T. Yovcheva, A. Viraneva, Study of polylactic acid corona electrets, Bulgarian Chemical Communications. 47 (Special Issue B) (2015) 115–120.
- [8] A.A. Guzhova, M.F. Galikhanov, Charge depth in polylactic acid electret filled with fine filler, Bulgarian Chemical Communications. 47 (Special Issue B) (2015) 103–108.
- [9] Yu.A. Gorokhovatskiy, M.F. Galikhanov, D.A. Ignatyeva, et al., Ways to increase the stability of the electret state in composite polylactide films, Bulletin of Kazan University of Technology. 20 (4) (2017) 27–30.
- [10] R.Kh. Khuziakhmetov, V.A. Khusnutdinov, R.S. Sayfullin, Polucheniye aktivnogo oksida magniya [Preparation of active magnesium oxide], Postepy Technologii Chemicznej Nieorganicznej: “CHEMTEX-93”. Wroclaw (1993) 107–114.
- [11] Yu.A. Gorokhovatskiy, L.B. Aniskina, A.S. Viktorovich, et al., The manifestation of the spin-orbit interaction in the vibrational spectra of polyelectrolytes – fibrous and film electrets based on polypropylene and polyethylene, Izvestia: Herzen University Journal of Humanities & Science. (79) (2009) 47–61.

Received 18.01.2018, accepted 24.01.2018.

THE AUTHORS**PLATKO Anastasiya P.** *Herzen State Pedagogical University of Russia*48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
stewnstewn@gmail.com**SOTOVA Yulia I.** *Herzen State Pedagogical University of Russia*48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
juliasotova1992@mail.ru**GOROKHOVATSKIY Yuriy A.** *Herzen State Pedagogical University of Russia*48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
yurig@fromru.com**KARULINA Elena A.** *Herzen State Pedagogical University of Russia*48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
karulina@mail.ru**GALIKHANOV Mansur F.** *Kazan National Research Technological University*68 Karl Marx St., Kazan, 420015, Russian Federation
mgalikhanov@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.111104

УДК 539.16.08

ЭМИССИОННЫЕ МЁССБАУЭРОВСКИЕ СПЕКТРЫ ДОЧЕРНИХ АТОМОВ ОЛОВА, ИЗМЕРЕННЫЕ В УСЛОВИЯХ ПОДВИЖНОГО РАДИОАКТИВНОГО РАВНОВЕСИЯ МАТЕРИНСКИХ ИЗОТОПОВ ТеллуРА С ДОЧЕРНИМИ ИЗОТОПАМИ СУРЬМЫ

Н.Н. Жуков, А.В. Марченко, К.Б. Шахович

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Методом эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии с материнским изотопом ^{119m}Te , находящимся в состоянии подвижного радиоактивного равновесия с дочерним изотопом ^{119}Sb , получена информация о валентном и координационном состояниях дочерних атомов ^{119m}Sn , образующихся из материнских атомов ^{119}Sb и ^{119m}Te в катионных и анионных узлах кристаллического теллурида свинца PbTe и в стеклообразном теллуриде мышьяка As_2Te_3 . Установлено, что соотношение различных валентных и координационных состояний атомов олова в кристаллах и стеклах зависит от времени приготовления мёссбауэровских источников, а также с помощью расчетов показано смещение части дочерних атомов ^{119}Sb из структурных позиций материнских атомов ^{119m}Te в результате распада последних.

Ключевые слова: подвижное радиоактивное равновесие; эмиссионная мёссбауэровская спектроскопия; изотоп; теллурид; свинец; мышьяк

Ссылка при цитировании: Жуков Н.Н., Марченко А.В., Шахович К.Б. Эмиссионные мёссбауэровские спектры дочерних атомов олова, измеренные в условиях подвижного радиоактивного равновесия материнских изотопов теллура с дочерними изотопами сурьмы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 34 – 43. DOI: 10.18721/JPM.111104

MÖSSBAUER EMISSION SPECTRA OF STANNUM DAUGHTER ISOTOPES MEASURED UNDER CONDITION OF A DYNAMIC RADIOACTIVE EQUILIBRIUM OF TELLURIUM PARENT ISOTOPES AND ANTIMONIUM DAUGHTER ONES

N.N. Zhukov, A.V. Marchenko, K.B. Shakhovich

Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russian Federation

The information on a valence and a coordination states of the ^{119m}Sn daughter atoms formed in the cationic and anionic lattice sites of the crystalline lead telluride PbTe and the glassy arsenic telluride As_2Te_3 from the ^{119}Sb and ^{119m}Te parent isotopes has been obtained using the emission Mössbauer spectroscopy with the ^{119m}Te parent isotopes being in a dynamic radioactive equilibrium with the ^{119}Sb daughter ones. It was found by calculation and experimentally that the proportion of various valent and coordinate states of tin atoms in the crystal and the glass depended on the preparation moment of Mössbauer sources. Moreover, the displacement of a part of the ^{119}Sb daughter atoms from lattice sites of the ^{119m}Te parent isotopes as a result of a radioactive decay was established when bringing into agreement with experimental data.

Key words: dynamic radioactive equilibrium; Mössbauer emission spectroscopy; isotope; telluride; lead; arsenic

Citation: N.N. Zhukov, A.V. Marchenko, K.B. Shakhovich, Mössbauer emission spectra of stannum daughter isotopes measured under condition of a dynamic radioactive equilibrium of tellurium parent isotopes and antimonium daughter ones, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11(1) (2018) 34 – 43. DOI: 10.18721/JPM.11104

Введение

Эмиссионная мёссбауэровская спектроскопия на изотопе олова ^{119m}Sn с материнскими ядрами сурьмы ^{119}Sb и теллура ^{119m}Te широко используется для исследования состояния примесных атомов в кристаллических халькогенидах свинца и стеклообразных халькогенидах мышьяка и германия [1 – 11]. В зависимости от химической природы материнского изотопа, дочерние атомы олова могут стабилизироваться либо в узлах подрешетки халькогена (если используется изотоп ^{119m}Te) [2, 3, 5, 7, 8], либо в позициях, не определенных заранее (если используется изотоп ^{119}Sb) [1, 4, 6 – 11].

В настоящей работе применяется метод измерения эмиссионных мёссбауэровских спектров ^{119m}Sn для источников на основе кристаллического теллурида свинца PbTe и

стеклообразного теллурида мышьяка As_2Te_3 , содержащих одновременно материнские изотопы ^{119m}Te и ^{119}Sb . Спектры позволили получить информацию о состоянии материнских примесных атомов теллура, сурьмы и дочерних примесных атомов олова.

Объекты и методика исследования

Как следует из рис. 1, распад материнских атомов ^{119m}Te происходит с образованием дочерних радиоактивных ядер ^{119}Sb , и к моменту установления подвижного равновесия (максимальной концентрации изотопа ^{119}Sb) образуется смесь радиоактивных атомов теллура (обозначим их $^{119m}\text{Te-1}$) и сурьмы (обозначим их $^{119}\text{Sb-1}$).

Доля атомов $^{119m}\text{Te-1}$ в единицах исходного содержания атомов ^{119m}Te составляет 0,575, а доля атомов $^{119}\text{Sb-1}$ – 0,195.

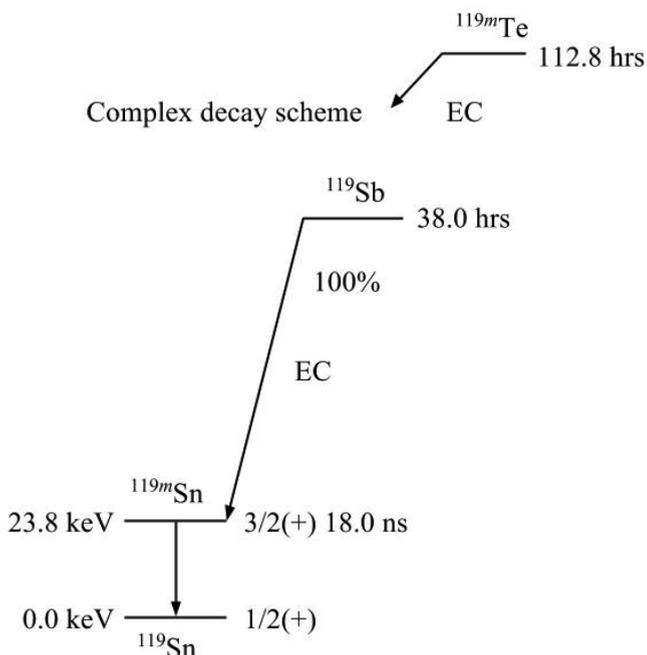
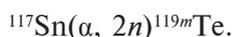


Рис. 1. Схема распада материнских изотопов ^{119m}Te и ^{119}Sb .

Указаны периоды распада и выделяемая при этом энергия. Распад сопровождается электронным захватом (EC)

Эта смесь сплавлялась со стеклообразным теллуридом мышьяка As_2Te_3 или кристаллическим теллуридом свинца $PbTe$ в вакуумированных кварцевых ампулах. При этом оценочная концентрация примесных атомов не превышала 10^{17} см^{-3} . Закалка расплава As_2Te_3 проводилась на воздухе; критериями стеклообразного состояния служили раковистый излом, отсутствие линий на дебаеграммах, отсутствие включений и неоднородностей при просмотре полированных поверхностей в металломикроскопе МИМ-7 и инфракрасном микроскопе МИК-1. Исходные образцы $PbTe$ относились к электронному (с избытком свинца, $n \approx 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) и дырочному (с избытком теллура, $p \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$) типам. Количественный состав стекол и кристаллов контролировался методом рентгенофлуоресцентного анализа.

Изотоп ^{119m}Te получали по реакции



Для выделения безносительного препарата ^{119m}Te использовали процедуру анионного обмена [5].

Мёссбауэровские спектры ^{119m}Sn измерялись на спектрометре СМ-2201 при температуре 80 К со станнатом кальция $CaSnO_3$ (поверхностная плотность по олову 5 мг/см^2) в качестве поглотителя. Далее приведены типичные мёссбауэровские спектры образцов $PbTe$: ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) и As_2Te_3 : ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) и результаты их обработки в виде графических зависимостей.

Для каждого источника регистрировалась серия эмиссионных спектров ^{119m}Sn с длительностью набора 9,5 ч во временном интервале с момента окончания сплавления образцов до 190,5 ч. Очевидно, что в начальный период измерения мёссбауэровских спектров образцов $PbTe$: ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) и As_2Te_3 : ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) основной вклад в спектры ^{119m}Sn дают материнские атомы $^{119}Sb-1$ (постоянная распада $\lambda_{Sb} = 5,05 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$), тогда как по мере накопления вторичной сурьмы $^{119}Sb-2$, образующейся при распаде $^{119m}Te-1$ ($\lambda_{Te} = 1,70 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$), возрастает интенсивность спектра от материнских атомов $^{119}Sb-2$.

Экспериментальные результаты, их обработка и обсуждение

Теллурид свинца. Экспериментальные мёссбауэровские спектры изотопа ^{119m}Sn для образцов n - $PbTe$: ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) (электронный теллурид свинца) и p - $PbTe$: ($^{119}Sb + ^{119m}Te$) (дырочный теллурид свинца) представляют собой наложение двух линий (рис. 2).

Одна из них имеет изомерный сдвиг 2,31(2) мм/с; он типичен для изомерных сдвигов мёссбауэровских спектров ^{119}Sn интерметаллических соединений олова, и в соответствии с этим указанную линию следует приписать центрам $^{119m}Sn^0$, образовавшимся после цепочки распадов



в узлах подрешетки теллура (спектр I).

Вторая линия имеет изомерный сдвиг 3,42(2) мм/с; она отвечает теллуриду олова и, следовательно, эту линию можно приписать двухвалентным центрам $^{119m}Sn^{2+}$, образовавшимся после распада атомов $^{119}Sb-1$ в узлах подрешетки свинца (спектр II).

Видно, что для дырочного образца интенсивность спектра $^{119m}Sn^0$ в подрешетке теллура возрастает со временем, которое прошло от момента синтеза мёссбауэровских источников (в дальнейшем будем называть эту переменную времени возрастом источника), тогда как для электронного образца отношение площадей под двумя линиями изменяется лишь незначительно. Если принять во внимание, что примесные атомы олова в теллуриде свинца электрически неактивны [4, 5], то различное поведение мёссбауэровских спектров ^{119m}Sn для дырочных и электронных образцов теллурида свинца требует объяснения.

Для количественного описания изменения структуры мёссбауэровских спектров ^{119m}Sn в теллуриде свинца были вычислены экспериментальные отношения

$$P = \frac{SI}{SI + SII}$$

для различных значений возраста источников (здесь SI , SII — площади под нормированными мёссбауэровскими спектрами I и II соответственно).

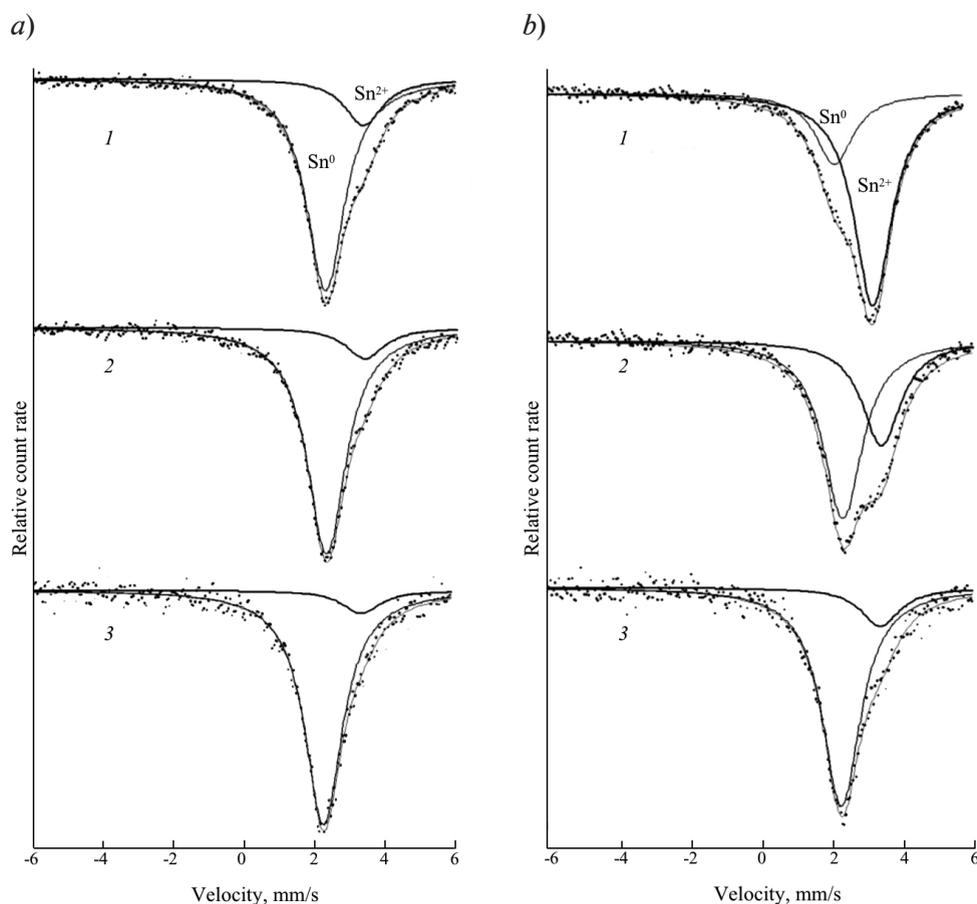


Рис. 2. Эмиссионные мёссбауэровские спектры ^{119m}Sn в $n\text{-PbTe}$ (a) и $p\text{-PbTe}$ (b). Спектры получены при 80 К в интервалах времен 0 – 9,5 ч (1), 66,7 – 76,2 ч (2) и 152,4–190,5 ч (3) после приготовления мёссбауэровского источника. Показаны линии эмиссии, отвечающие центрам Sn^0 и Sn^{2+}

Площадь S под спектром ^{119m}Sn пропорциональна концентрации атомов сурьмы N_{Sb} и фактору Мессбауэра f в соответствующей подрешетке:

$$S \sim f N_{\text{Sb}}.$$

Атомы сурьмы ^{119}Sb являются непосредственными радиоактивными предшественниками изотопа ^{119m}Sn .

Зависимость концентрации N_{Sb} от времени t можно получить из уравнения баланса:

$$N_{\text{Sb}} = \frac{\lambda_{\text{Te}}}{\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}}} N_{\text{Te}}^0 [\exp(-\lambda_{\text{Te}} t) - \exp(-\lambda_{\text{Sb}} t)] + N_{\text{Sb}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}} t), \quad (1)$$

где λ_{Te} , λ_{Sb} – постоянные распада соответствующих материнских изотопов; N_{Te}^0 ,

N_{Sb}^0 – концентрации атомов ^{119m}Te и ^{119}Sb в начальный момент времени; нижний индекс Te указывает, что берется концентрация ^{119m}Te в той же подрешетке, что и Sb.

Поскольку концентрацией N_{Te}^0 в подрешетке свинца можно пренебречь, то вместо выражения (1) получим:

$$N_{\text{Sb in Pb}} = N_{\text{Sb in Pb}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}} t), \quad (2)$$

где $N_{\text{Sb in Pb}}^0$ – концентрация атомов Sb-1 в узлах свинца.

Аналогичным образом для подрешетки теллура имеем:

$$N_{\text{Sb in Te}} = \frac{\lambda_{\text{Te}}}{\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}}} N_{\text{Te}}^0 [\exp(-\lambda_{\text{Te}} t) - \exp(-\lambda_{\text{Sb}} t)] + N_{\text{Sb}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}} t), \quad (3)$$

при этом общая концентрация Sb-1 определяется как

$$N_{\text{Sb}}^0 = N_{\text{Sb in Pb}}^0 + N_{\text{Sb in Te}}^0.$$

Таким образом, отношение площадей под нормированными спектрами может быть записано в следующем виде:

$$P = \left[\left\{ \frac{\lambda_{\text{Te}}}{\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}}} N_{\text{Te}}^0 [\exp(-\lambda_{\text{Te}}t) - \exp(-\lambda_{\text{Sb}}t)] + N_{\text{Sb in Te}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}}t) \right\} \cdot f_{\text{Te}} \right] \times \left[\left\{ \frac{\lambda_{\text{Te}}}{\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}}} N_{\text{Te}}^0 [\exp(-\lambda_{\text{Te}}t) - \exp(-\lambda_{\text{Sb}}t)] + N_{\text{Sb in Te}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}}t) \right\} \cdot f_{\text{Te}} + N_{\text{Sb in Pb}}^0 \exp(-\lambda_{\text{Sb}}t) \cdot f_{\text{Pb}} \right]^{-1} \quad (4)$$

Соотношение (4) позволяет с помощью экстраполяции графиков на рис. 3 получить значения

$$q = \frac{N_{\text{Sb in Te}}^0 f_{\text{Te}}}{N_{\text{Sb in Te}}^0 f_{\text{Te}} + N_{\text{Sb in Pb}}^0 f_{\text{Pb}}},$$

равные 0,2 для *p*-PbTe и 0,8 для *n*-PbTe.

Если не учитывать различие в факторах Мёссбауэра в узлах подрешетки теллура f_{Te} и в узлах подрешетки свинца f_{Pb} (что справедливо при 80 K), то эти величины показывают долю Sb-1, попавшую при синтезе в структурные позиции теллура. В электронном образце *n*-PbTe (избыток атомов свинца и вакансии теллура) атомы Sb-1 с вероятностью около 0,8 заполняют вакансии теллура, в то время как в дырочном образце *p*-PbTe большая часть атомов сурьмы оказывается в решеточных узлах свинца.

Временные зависимости отношения площадей $P(t)$ для электронного и дырочного теллуридов свинца, рассчитанные по формуле (4) с полученным выше распределением Sb-1 по подрешеткам и с учетом значения

$$m = \frac{N_{\text{Te}}^0}{N_{\text{Sb}}^0} = 2,949,$$

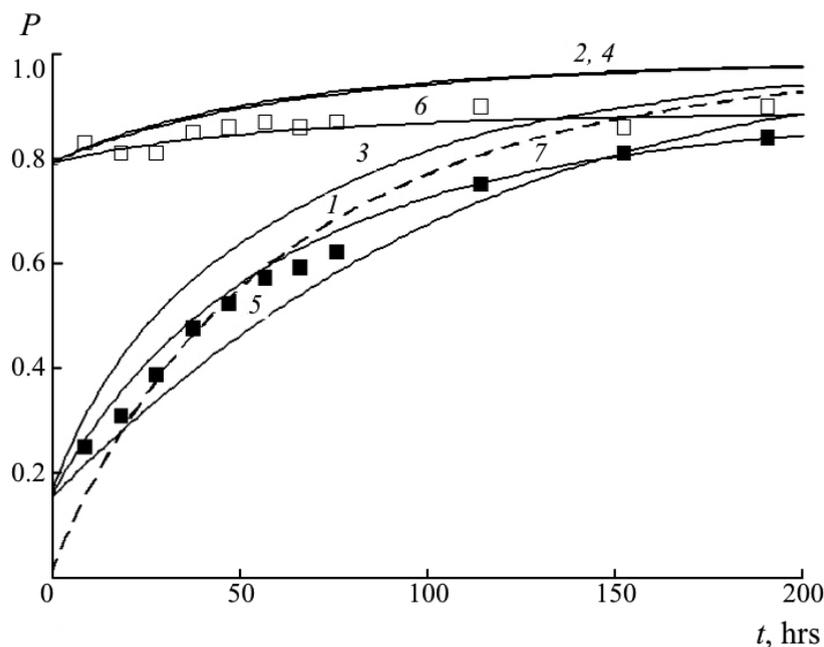


Рис. 3. Экспериментальные (символы) и расчетные (кривые 1 – 7) зависимости отношения P от возраста источников для электронных (затушеванные квадраты, кривые 2, 4, 6) и дырочных (пустые квадраты, кривые 3, 5, 7) образцов $\text{PbTe}:(^{119}\text{Sb}+^{119m}\text{Te})$; расчетные зависимости получены при различных предположениях, когда варьируется содержание атомов ^{119}Sb в подрешетке свинца (также кривая 1) (см. описание в тексте)

вместе с экспериментальными величинами P приведены на рис. 3.

Кривая 1, рассчитанная в предположении, что все атомы $^{119}\text{Sb-1}$ находятся в подрешетке свинца, а все атомы $^{119m}\text{Te-1}$ — в подрешетке теллура, существенно отклоняется от поведения экспериментальных величин как для дырочного теллурида свинца, так и (в особенности) для электронного. Если учесть рассмотренное выше предположение о попадании части $^{119}\text{Sb-1}$ в подрешетку теллура, то рассчитанные зависимости $P(t)$ удовлетворительно описывают экспериментальные данные для малого возраста источников, но дают завышенные значения

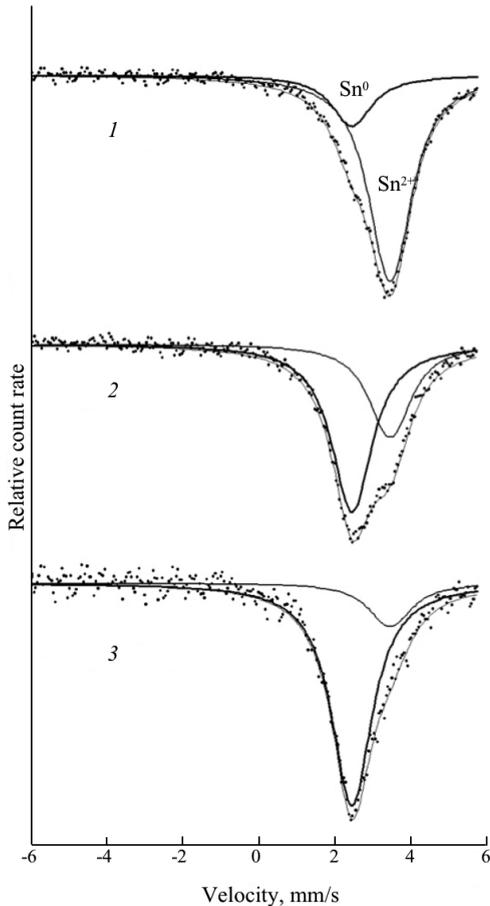


Рис. 4. Эмиссионные мёссбауэровские спектры ^{119m}Sn в стеклообразном образце As_2Te_3 ; ($^{119}\text{Sb} + ^{119m}\text{Te}$). Условия регистрации спектров и их обозначения идентичны приведенным на рис. 2. Показаны также линии эмиссии, отвечающие центрам Sn^0 и Sn^{2+}

для спектров, измеренных через значительное время после приготовления источников (кривые 2 и 3 на рис. 3). Причинами такого расхождения могут быть, во-первых, меньшее значение фактора Мёссбауэра f_{Te} для структурных узлов теллура по сравнению с таковым для узлов свинца (f_{Pb}), а, во-вторых, смещение части атомов $^{119}\text{Sb-2}$ подрешетки теллура в подрешетку свинца. Такое перемещение может происходить за счет энергии отдачи, получаемой дочерними атомами $^{119}\text{Sb-2}$ при радиоактивном распаде материнских атомов $^{119m}\text{Te-1}$ [5].

Кривые 4 и 5 на рис. 3 показывают поведение величины $P(t)$, рассчитанной для дырочного и электронного теллурида свинца в предположении, что отношение $f_{\text{Te}}/f_{\text{Pb}} = 0,5$. Для дырочного образца это предположение заметно улучшает согласие с экспериментом, но практически не меняет вида кривой $P(t)$ для электронного образца. Следовательно, различие факторов Мёссбауэра не может объяснить пониженные значения $P(t)$ для спектров источников с большим возрастом. В дальнейших расчетах принималось, что $f_{\text{Te}}/f_{\text{Pb}} = 0,5$.

Кривые 6 и 7 на рис. 3 показывают поведение величины $P(t)$, рассчитанной для дырочного и электронного теллуридов свинца в предположении, что часть атомов $^{119}\text{Sb-2}$ (доля $\alpha = 0,1$) от их общего числа оказывается смещенной в подрешетку свинца. При этом соотношение (4) можно преобразовать к виду

$$P = 1 - \alpha - (1 - q - \alpha) \times \left(m \frac{\lambda_{\text{Te}}}{\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}}} \{ \exp[(\lambda_{\text{Sb}} - \lambda_{\text{Te}})t] - 1 \} + 1 \right)^{-1} \quad (5)$$

Для обоих типов образцов наблюдается удовлетворительное согласие с измеренными значениями P . Этот результат подтверждает и вывод работы [5] о смещении атомов $^{119}\text{Sb-2}$ при распаде материнских изотопов ^{119m}Te .

Теллурид мышьяка. Согласно данным работы [12], примесные атомы олова в стеклообразном теллуриде мышьяка As_2Te_3 электрически неактивны (в соответствии с общим правилом «нелегируемости» халько-

генидных стеклообразных полупроводников). Полученные нами экспериментальные мёссбауэровские спектры изотопа ^{119m}Sn в сплаве As_2Te_3 : ($^{119}\text{Sb} + ^{119m}\text{Te}$) представляют собой наложение двух линий (рис. 4).

Менее интенсивная линия при измерении спектра в интервале времени 0 – 19,05 ч имеет изомерный сдвиг 2,61(2) мм/с; он близок к изомерному сдвигу мёссбауэровского спектра ^{119}Sn в полуметаллическом соединении арсенида олова SnAs и, следовательно, эту линию можно приписать примесным центрам олова $^{119m}\text{Sn}^0$, образовавшимся после распада атомов ^{119m}Te -1 в узлах подрешетки теллура (спектр I). Относительная интенсивность этой линии увеличивается с возрастом источника, что также говорит о ее происхождении от ^{119m}Te -1 в структурных узлах теллура.

Изомерный сдвиг линии, интенсивность которой спадает с возрастом источника, составляет 3,65(2) мм/с; он близок к изомерному сдвигу мёссбауэровского спектра ^{119}Sn для соединения SnTe и, следовательно, эту линию можно приписать двухвалентным

примесным центрам олова $^{119m}\text{Sn}^{2+}$, образовавшимся после распада атомов ^{119}Sb -1 в узлах мышьяка (спектр II). Видно, что относительная интенсивность мёссбауэровского спектра $^{119m}\text{Sn}^0$ в узлах теллура увеличивается с возрастом источника.

Для количественного описания изменения структуры мёссбауэровских спектров ^{119m}Sn , представленных на рис. 4, были рассчитаны зависимости отношения

$$P = \frac{SI}{SI + SII}$$

от возраста источника $(\text{As}, ^{119}\text{Sb})_2^{119m}\text{Te}_3$.

Рассчитанные зависимости $P(t)$ вместе с соответствующими экспериментальными значениями P приведены на рис. 5. Если расчет величины P выполнить в предположении, что в процессе измерения мёссбауэровских спектров атомы ^{119}Sb -1 находятся в узлах подрешетки мышьяка, а атомы ^{119}Sb -2 – в узлах подрешетки теллура, то он дает завышенные значения отношения P . Для согласования этих данных необходимо предполо-

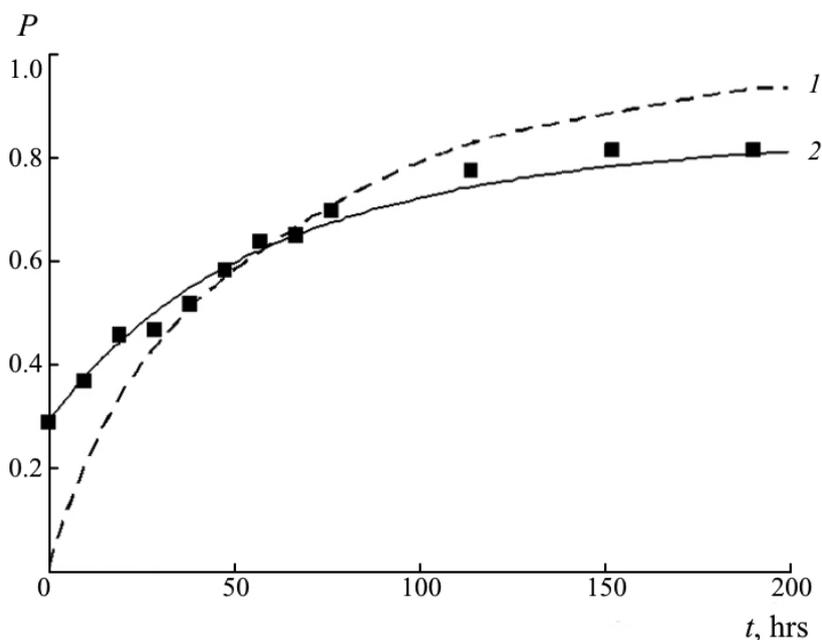


Рис. 5. Экспериментальные (символы) и расчетные (кривые 1, 2) зависимости отношения P от возраста источников для образцов стеклообразного As_2Te_3 ($^{119}\text{Sb}+^{119m}\text{Te}$); расчетные зависимости получены при различных предположениях, когда варьируется содержание атомов ^{119}Sb в подрешетке мышьяка (см. описание в тексте)



жить, что в процессе измерения спектров происходит перемещение доли атомов ($\alpha = 0,15(2)$) ^{119m}Te -1 из структурных узлов теллура в узлы подрешетки мышьяка (эта величина получается при экстраполяции экспериментальной зависимости $P(t)$ на $t \rightarrow \infty$) (сплошная линия I на рис. 5). Это перемещение может происходить за счет энергии отдачи, получаемой дочерними атомами ^{119}Sb -2 при радиоактивном распаде атомов ^{119m}Te -1. Кроме того, за время жизни ^{119}Sb (55 ч) возможна перестройка локального окружения образовавшихся атомов ^{119}Sb -2.

Заключение

Показано, что из серии эмиссионных мёссбауэровских спектров одного источника $^{119}\text{Sb} + ^{119m}\text{Te}$ может быть получена информация о месте локализации атомов сурьмы и теллура в кристаллической решетке теллурида свинца (или в узлах структурной сетки стеклообразного теллурида мышьяка) и о валентном состоянии дочерних атомов олова, образующихся из материнских атомов ^{119}Sb . Показано также смещение части дочерних атомов ^{119}Sb из структурных позиций материнских атомов ^{119m}Te в результате распада последних.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ambe F., Ambe S., Shoji H., Saito N. Mössbauer emission spectra of ^{119}Sn after the EC decay of ^{119}Sb in metals, oxides, and chalcogenides of antimony and tellurium // J. Chem. Phys. 1974. Vol. 60. No. 10. Pp. 3773–3778.
2. Ambe F., Ambe S. Mössbauer emission studies of defect ^{119}Sn , ^{119}Sb , and ^{119m}Te atoms after nuclear decays and reactions in SnSb, SnTe, and Sb_2Te_3 // J. Chem. Phys. 1980. Vol. 73. No. 5. Pp. 2029–2036.
3. Ambe F., Ambe S. A site distribution study of dilute ^{119}Sb and ^{119m}Te on solidification of SnTe and SnSb by Mössbauer emission spectroscopy of ^{119}Sn // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 75. No. 5. Pp. 2463–2465.
4. Мастеров В.Ф., Насрединов Ф.С., Немов С.А., Серегин П.П., Троицкая Н.Н., Бондаревский С.И. Положение примесных атомов сурьмы в решетке PbTe, определенное методом эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31. № 11. С. 1321–1322.
5. Мастеров В.Ф., Бондаревский С.И., Насрединов Ф.С., Серегин Н.П., Серегин П.П. Антиструктурные дефекты в полупроводниках типа PbTe // Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33. № 7. С. 772–773.
6. Мастеров В.Ф., Насрединов Ф.С., Серегин П.П., Серегин Н.П., Ермолаев А.В., Бондаревский С.И. Положение примесных атомов сурьмы в решетке PbS, определенное методом эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии на изотопе ^{119}Sb (^{119m}Sn) // Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33. № 8. С. 913–915.
7. Немов С.А., Серегин П.П., Кожанова Ю.В., Серегин Н.П. Двухэлектронные центры олова, образующиеся в халькогенидах свинца в результате ядерных превращений // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37. № 12. С. 1414–1419.
8. Seregin N.P., Seregin P.P., Nemov S.A., Yanvareva A.Y. Antistructural defects in lead chalcogenides // J. Phys.: Condensed Matter. 2003. Vol. 15. No. 44. Pp. 7591–7597.
9. Бордовский Г.А., Немов С.А., Марченко А.В., Зайцева А.В., Кожокарь М.Ю., Серегин П.П. Состояния атомов сурьмы и олова в халькогенидах свинца // Физика и техника полупроводников. 2011. Т. 45. № 4. С. 437–440.
10. Бордовский Г.А., Марченко А.В., Анисимова Н.И., Зайцева А.В., Серегин П.П. Двухэлектронные центры олова с отрицательной корреляционной энергией в сульфиде свинца // Физика и химия стекла. 2013. Т. 39. № 2. С. 297–307.
11. Марченко А.В., Николаева А.В., Серегин П.П., Шалденкова А.В., Бобохужаев К.У. Двухэлектронный обмен между U -минус центрами олова в кристаллических и стеклообразных халькогенидных полупроводниках // Физика и химия стекла. 2016. Т. 42. № 2. С. 232–243.
12. Бордовский Г.А., Марченко А.В., Серегин П.П., Али Н.М., Гладких П.В., Кожокарь М.Ю. Двухэлектронные центры олова, образующиеся в халькогенидных стеклах в результате ядерных превращений // Физика и химия стекла. 2010. Т. 36. № 6. С. 828–834.

Статья поступила в редакцию 19.01.2018, принята к публикации 24.01.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЖУКОВ Николай Николаевич – ассистент кафедры компьютерного обучения и электронных технологий Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
nzhukov@herzen.spb.ru

МАРЧЕНКО Алла Валентиновна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
al7140@rambler.ru

ШАХОВИЧ Кирилл Борисович – аспирант кафедры физической электроники Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48
shakhovichkirill@gmail.com

REFERENCES

[1] F. Ambe, S. Ambe, H. Shoji, N. Saito, Mössbauer emission spectra of ^{119}Sn after the EC decay of ^{119}Sb in metals, oxides, and chalcogenides of antimony and tellurium, *J. Chem. Phys.* 60 (10) (1974) 3773–3778.

[2] F. Ambe, S. Ambe, Mössbauer emission studies of defect ^{119}Sn , ^{119}Sb , and ^{119m}Te atoms after nuclear decays and reactions in SnSb, SnTe, and Sb_2Te_3 , *J. Chem. Phys.* 73(5) (1980) 2029–2036.

[3] F. Ambe, S. Ambe, A site distribution study of dilute ^{119}Sb and ^{119m}Te on solidification of SnTe and SnSb by Mössbauer emission spectroscopy of ^{119}Sn , *J. Chem. Phys.* 75 (5) (1981) 2463–2465.

[4] V.F. Masterov, F.S. Nasredinov, S.A. Nemov, et al., Position of antimony impurity atoms in PbTe lattice determined by emission Mössbauer spectroscopy, *Semiconductors.* 31 (11) (1997) 1138–1139.

[5] V.F. Masterov, S.I. Bondarevskii, F.S. Nasredinov, et al., Antistructural defects in PbTe-type semiconductors, *Semiconductors.* 33 (7) (1999) 710–711.

[6] V.F. Masterov, F.S. Nasredinov, P.P. Seregin, et al., Determining the position of antimony impurity atoms in PbS by ^{119}Sb (^{119m}Sn) emission Mössbauer spectroscopy, *Semiconductors.* 33 (8) (1999) 836–837.

[7] S.A. Nemov, P.P. Seregin, Yu.V. Kozhanova, N.P. Seregin, Two-electron tin centers formed in lead chalcogenides as a result of nuclear transmutations, *Semiconductors.* 37 (12) (2003) 1367–1372.

[8] N.P. Seregin, P.P. Seregin, S.A. Nemov, A.Y. Yanvareva, Antistructural defects in lead chalcogenides, *J. Phys.: Condensed Matter.* 15 (44) (2003) 7591–7597.

[9] G.A. Bordovsky, A.V. Marchenko, A.V. Zaiceva, et al., States of antimony and tin atoms in lead chalcogenides, *Semiconductors.* 45 (4) (2011) 427–430.

[10] G.A. Bordovsky, A.V. Marchenko, N.I. Anisimova, et al., Two-electron tin centers with a negative correlation energy in lead sulfide, *Glass Physics and Chemistry.* 39 (2) (2013). 201–207.

[11] A.V. Marchenko, A.V. Nikolayeva, P.P. Seregin, et al., The two-electron exchange between U^- tin centers in crystal and glass-like chalcogenide semiconductors, *Glass Physics and Chemistry.* 42 (2) (2016) 164–171.

[12] G.A. Bordovsky, A.V. Marchenko, P.P. Seregin, et al., Two-electron tin centers formed in chalcogenide glasses as a result of nuclear transformations, *Glass Physics and Chemistry.* 36 (6) (2010) 652–656.

Received 19.01.2018, accepted 24.01.2018.

THE AUTHORS

ZHUKOV Nikolay N.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation
nzhukov@herzen.spb.ru

MARCHENKO Alla V.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation

al7140@rambler.ru

SHAKHOVICH Kirill B.

Herzen State Pedagogical University of Russia

48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation

shakhovichkirill@gmail.com

DOI: 10.18721/JPM.111105

УДК 535.33, 681.586.36

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА АКТИВИРОВАННЫХ ФТОРАЛЮМИНАТНЫХ СТЕКОЛ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ СЕНСОРОВ

В.А. Клинков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе представлены результаты исследования спектрально-люминесцентных свойств фторалюминатных стекол, активированных ионами эрбия Er^{3+} . Объектами исследования служили образцы стекла состава $98\text{MgCaSrBaYAl}_2\text{F}_{14}-2\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$ с содержанием активатора 0,1 – 1,0 мол. %. Получены и проанализированы спектры оптического поглощения в области 190 – 1700 нм, демонстрирующие наличие характеристических полос поглощения, связанных с электронными переходами ионов Er^{3+} в возбужденные состояния из основного состояния $^4I_{15/2}$. При температурах 77 и 300 К получены и интерпретированы спектры апконверсионной люминесценции в спектральной области 450 – 900 нм, а также рассчитаны отношения интенсивностей полос флуоресценции, обусловленных излучательными переходами в основное состояние с термически связанных уровней. В результате исследования установлено, что наибольшим откликом на изменение температуры обладает образец с содержанием активатора 0,1% Er^{3+} ; доказана перспективность исследованной системы для создания оптических температурных сенсоров.

Ключевые слова: оптический температурный сенсор; редкоземельный ион; спектр поглощения; люминесценция; фторалюминатное стекло

Ссылка при цитировании: Клинков В.А. Спектрально-люминесцентные свойства активированных фторалюминатных стекол, перспективных для создания оптических температурных сенсоров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 44 – 54. DOI: 10.18721/JPM.111105

SPECTRAL AND LUMINESCENT PROPERTIES OF DOPED FLUOROALUMINATE GLASSES PROMISING FOR OPTICAL TEMPERATURE SENSORS

V.A. Klinkov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

Spectral and luminescent properties of Er^{3+} -doped fluoroaluminate glasses have been studied and presented in the paper. The subject of inquiry was $98\text{MgCaSrBaYAl}_2\text{F}_{14}-2\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$ glass, the ErF_3 concentrations were of 0.1 – 1.0 mol. %. The optical absorption spectra were analyzed in the range from 190 to 1700 nm, and the nature of absorption bands was explained on a basis of the Er^{3+} ion energy diagram. The up-conversion spectra were measured at 77 and 300 K in the 500 – 700 nm range upon 975 nm laser excitation. The temperature dependences of FIR were calculated using the experimental data in a range of (77 – 300) K. Among the samples under investigation the 0.1% ErF_3 one possessed the greatest response to temperature changes in the range of (77 – 300) K. The studied material was proved to be a candidate for realizing the optical temperature sensors.



Key words: optical temperature sensor; rare-earth ion; absorption spectrum; luminescence; fluoroaluminate glass

Citation: V.A. Klinkov, Spectral and luminescent properties of doped fluoroaluminate glasses promising for optical temperature sensors, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 44 – 54. DOI: 10.18721/JPM.111105

Введение

На сегодняшний день множество прикладных и фундаментальных исследований направлено на синтез новых стеклообразных материалов для ближнего и среднего инфракрасного (ИК) диапазонов, поскольку номенклатура имеющихся материалов ограничена. В указанных спектральных областях расположены колебательно-вращательные полосы поглощения большинства молекул и химических соединений, что позволяет их идентифицировать методами ИК-спектроскопии [1].

К материалам среднего ИК-диапазона относятся бескислородные стекла, в частности фторидные и халькогенидные. Последние характеризуются не только более широкой полосой пропускания электромагнитного излучения в ИК-области, чем у кварцевых стекол, но и меньшими оптическими потерями (последнее показано теоретическими исследованиями) [2]. Создание оптических волоконных усилителей и волоконных лазеров на основе бескислородных стекол, активированных редкоземельными элементами, имеют существенную практическую значимость для телекоммуникационных линий связи [3]. Именно бескислородным стеклам свойственна важная отличительная черта: высокочастотная граница колебательного спектра для них существенно ниже, чем для оксидных стекол; вследствие этого снижается вероятность внутрицентровых безызлучательных процессов [4] и повышается квантовый выход люминесценции активаторов, введенных в матрицу стекла. Кроме того, в бескислородных фторидных и халькогенидных стеклах существует возможность реализовать лазерные электронные переходы, которые в оксидных стеклах тушатся тепловыми колебаниями решетки стеклообразной матрицы.

Исследования бескислородных стекол, активированных трехвалентными ионами редкоземельных элементов, проводятся с

целью создания на их основе лазеров для ближнего и среднего ИК-диапазонов [4], волоконных лазеров [5], волоконных усилителей [6] и оптических сенсоров [7, 8]. В частности, на основе таких стекол, активированных ионами эрбия Er^{3+} , были созданы альтернативные кварцевым оптические волоконные усилители для волоконно-оптических линий связи, оптические температурные сенсоры [9], работающие на основе явления апконверсионной люминесценции с использованием методики FIR (Fluorescence Intensity Ratio).

Главными преимуществами оптических температурных детекторов перед классическими контактными методами измерения являются высокая температурная чувствительность и низкая инерционность, компактность, возможность использования в экстремальных окружающих условиях, электромагнитная пассивность и высокая помехоустойчивость [10]. На сегодняшний день вопрос выбора стеклообразной матрицы для оптических температурных сенсоров остается открытым, однако в исследовании [11] было показано, что ключевую роль в чувствительности оптических температурных датчиков играет стеклообразная матрица: наилучшие результаты получены для стеклообразных систем, обладающих меньшими значениями высокочастотной границы колебательного спектра.

Таким образом, по люминесцентным свойствам (в частности, с учетом явления апконверсионной люминесценции) халькогенидные и фторидные стекла можно считать наиболее перспективными для создания оптических температурных датчиков.

К недостаткам халькогенидных стекол следует отнести низкую химическую и термическую стойкость, токсичность, несовместимость с кварцевыми стеклами по показателю преломления ($n > 2,2$) и термическим параметрам, сложность синтеза и низкий уровень растворимости активных

примесей, таких как переходные и редкоземельные элементы.

Фторидные стекла позволяют вводить высокие концентрации редкоземельных активаторов, имеют близкий к кварцевому волокну показатель преломления ($n \approx 1,5$), высокую термическую устойчивость и широкую область прозрачности (от 0,25 до 8,00 мкм), что делает их лучшими стеклообразными материалами для создания активных оптических сред для среднего ИК-диапазона.

В данной работе изучены спектрально-люминесцентные свойства фторалюминатных стекол состава $98\text{MgCaSrBaYAl}_2\text{F}_{14}-2\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$, активированных ионами эрбия Er^{3+} , а также зарегистрированы и интерпретированы спектры апконверсионной люминесценции, полученные при температурах 77 и 300 К.

В области температур 77 – 300 К на основе экспериментальных данных были рассчитаны отношения интенсивностей полос флуоресценции, обусловленных энергетическими переходами в основное состояние с термически связанных уровней. По имеющимся в литературе сведениям, стекла указанного состава с данным активатором ранее не исследовались как чувствительные элементы для апконверсионных температурных сенсоров.

Состав стекла был выбран с учетом результатов, полученных ранее в работах [12, 13]. В частности, для выбранного состава наблюдаются пониженная кристаллизационная способность, высокая гомогенность и минимальное содержание ОН-групп, а также широкая полоса пропускания, вплоть до 6,4 мкм.

Методика эксперимента

Синтез стекол проводился в тиглях марки СУ-2000 в течение 1 ч при температурах 850 – 950 °С, без перемешивания стекломассы, в атмосфере аргона. Варка стекла в инертной атмосфере аргона проводилась с целью исключения попадания в расплав примесей из окружающего воздуха, в частности таких, как вода, железо и гидроксильные группы. Фторид эрбия вводился сверх 100 мол. %. Полученные таким обра-

Таблица

Содержание активатора во фторидных стеклах состава $98\text{MgCaSrBaYAl}_2\text{F}_{14}-2\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$ и обозначение образцов

| Содержание Er^{3+} , мол. % | Обозначение образца |
|--------------------------------------|----------------------|
| 0,1 | 0.1 % ErF_3 |
| 0,5 | 0.5 % ErF_3 |
| 1,0 | 1.0 % ErF_3 |

Примечание. Активатор вводился в стеклообразную матрицу через фторид эрбия ErF_3 сверх 100 мол. %.

зом образцы стекла были нарезаны в форме плоскопараллельных пластин толщиной 1 мм, отшлифованы и отполированы. Составы и названия образцов стекол приведены в таблице.

Регистрация спектров оптического поглощения проводилась на спектрофотометре Lambda 900 (Фирма Perkin-Elmer LLC, США) при комнатной температуре (300 К).

В качестве источника излучения накачки использовался титан-сапфировый лазер с рабочей длиной волны $\lambda = 975$ нм (модель 3900 Spectra Physics), работающий в непрерывном режиме. Спектры люминесценции в диапазоне 450 – 900 нм регистрировались с использованием высокочувствительного оптоволоконного спектрофотометра AvaSpec-2048 USB2, монохроматора Acton-300 (фирма Acton Research Corporation) и приемника ID-441 (Acton Research Corporation). Для низкотемпературных измерений использовался термостат с оптическими окнами Cell Specac GS21525 в паре с диффузионным насосом.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены спектры оптического поглощения образцов фторалюминатных стекол в диапазоне 190 – 1700 нм. Наблюдаемые полосы в указанном диапазоне соответствуют внутриконтинуальным переходам $4f^{11} \rightarrow 4f^{11}$ из основного состояния $^4I_{15/2}$ в возбужденные состояния иона Er^{3+} , при этом положение максимумов данных полос соответствует широко известной диаграмме Дике [14].

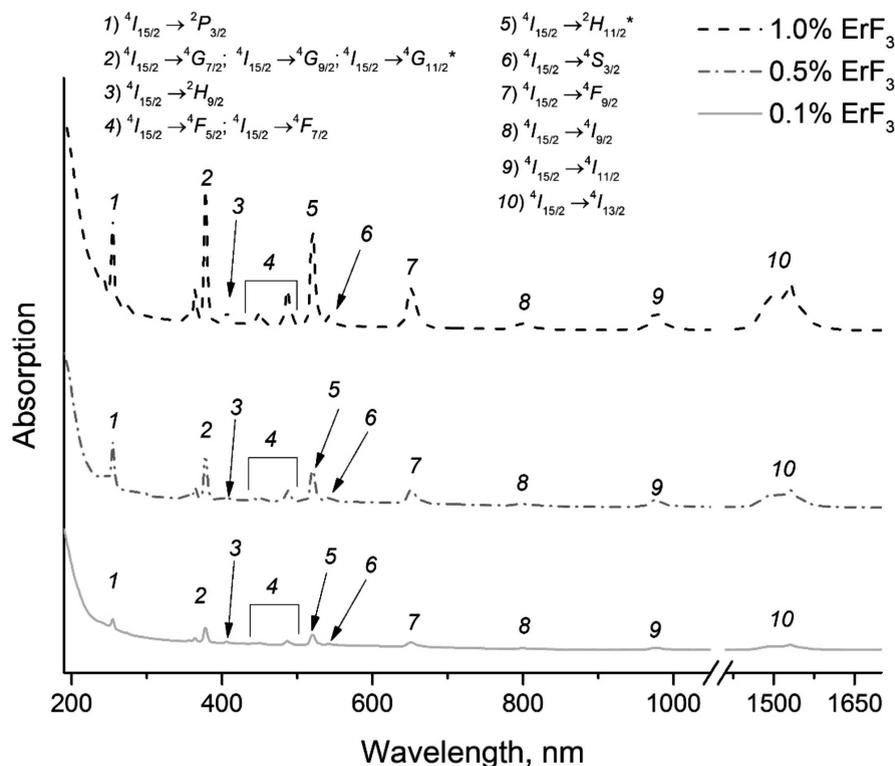


Рис. 1. Спектры оптического поглощения образцов фторалюминатного стекла (0,1 – 1,0) % ErF_3 в диапазоне 190 – 1700 нм.

Звездочками отмечены сверхчувствительные переходы ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ и ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4G_{11/2}$

Наиболее интенсивные и широкие полосы поглощения имеют максимумы около 378, 487, 521, 651, 976 и 1532 нм и соответствуют переходам из основного состояния ${}^4I_{15/2}$ на уровни ${}^4G_{11/2}$, ${}^4F_{7/2}$, ${}^2H_{11/2}$, ${}^4F_{9/2}$, ${}^4I_{11/2}$ и ${}^4I_{13/2}$, соответственно. Положение максимумов полос поглощения не меняется при увеличении концентрации активатора и приводит лишь к относительному росту интенсивности поглощения, что косвенно может свидетельствовать о гомогенном распределении активатора.

Чтобы проконтролировать соответствие действительной концентрации поглощающих центров (ионы эрбия Er^{3+}) расчетным значениям, а также подтвердить отсутствие сегрегационных явлений активатора в стекле [15], проверялось выполнение закона Бугера – Ламберта – Бера [16] для полос с наибольшими значениями коэффициента поглощения: 378, 521, 976 и 1532 нм (указаны позиции максимумов). График зави-

симости коэффициентов поглощения от концентрации активатора представлен на рис. 2. Полученная линейная зависимость свидетельствует о выполнении данного закона и о соответствии действительных концентраций ионов активатора расчетным значениям.

Узкие и хорошо разрешенные полосы поглощения, связанные со сверхчувствительными электронными переходами ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ и ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4G_{11/2}$, также свидетельствует о гомогенности распределения активатора в исследуемых образцах. Таким образом, анализ полученных спектров оптического поглощения показал, что в исследуемых образцах не наблюдаются сегрегационные эффекты и отсутствует неоднородное уширение полос поглощения. Это свидетельствует о том, что увеличение концентрации ионов Er^{3+} не приводит к нарушению структуры стекла и не создает разнообразия локальных областей, которые

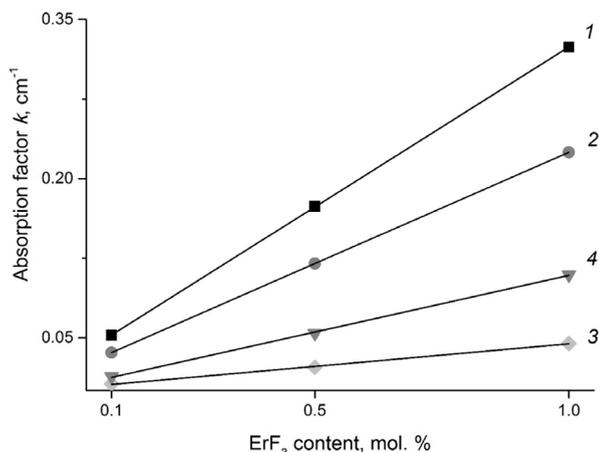


Рис. 2. Концентрационные зависимости коэффициента оптического поглощения для электронных переходов на длинах волн 378 нм (1), 521 нм (2), 976 нм (3) и 1532 нм (4) в образцах фторалюминатного стекла, активированных ионами Er^{3+}

могут занимать ионы Er^{3+} [17].

На рис. 3 приведены спектры апконверсионной люминесценции образцов активированных фторалюминатных стекол в диапазоне 450 – 900 нм, полученные при возбуждении когерентным излучением титан-сапфирового лазера на длине волны $\lambda = 975$ нм, работающего в непрерывном режиме, при температурах 300 и 77 К.

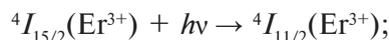
Рассмотрим спектры люминесценции, полученные при 300 К (рис. 3, а). Спектры включают три группы полос: в зеленой области с максимумами около 522 и 550 нм, в красной – 660 нм и ближней ИК-области с максимумом эмиссии около 850 нм.

Первая группа полос обусловлена электронными переходами с уровней ${}^2H_{11/2}$ (522 нм) и ${}^4S_{3/2}$ (550 нм) в основное состояние ${}^4I_{15/2}$. При этом данные уровни заселяются с вышележащего уровня ${}^2F_{7/2}$ путем механизма переноса энергии возбуждения [13]. Схема энергетических уровней иона Er^{3+} и механизм переноса энергии возбуждения при накачке излучением лазера с длиной волны $\lambda = 975$ нм представлены на рис. 3, с.

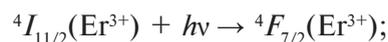
Рассмотрим подробнее механизм переноса энергии возбуждения, включающий поглощение из основного состояния, поглощение из возбужденного состояния и

обменное взаимодействие. С учетом вышеописанных актов, заселение уровня ${}^4F_{7/2}$ может происходить по следующей схеме:

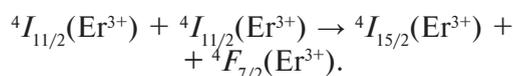
поглощение из основного состояния по реакции



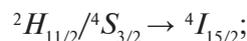
поглощение из возбужденного состояния по реакции



обменное взаимодействие, согласно реакции

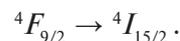


Далее, с уровня ${}^4F_{7/2}$ совершается безызлучательная релаксация на уровни ${}^4H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$, а затем реализуется излучательный переход в основное состояние по схеме



при этом максимумы пиков люминесценции позиционируются на длинах волн около 522 и 550 нм, соответственно.

Красная полоса люминесценции (660 нм) связана с электронным переходом



Заселенность уровня ${}^4F_{9/2}$ осуществляется с участием вышележащих энергетических уровней ${}^4F_{7/2}$, ${}^4H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$ через процесс безызлучательной релаксации. С учетом многостадийности механизма заселения, населенность уровня ${}^4F_{9/2}$ существенно ниже, чем уровней ${}^4H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$, что приводит к существенно меньшей относительной интенсивности полосы люминесценции с максимумом около 660 нм.

Третья полоса люминесценции в области 850 нм обусловлена электронным переходом ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$. Важно обратить внимание на наличие отмеченной полосы, поскольку в данном случае реализуется переход не из возбужденного состояния в основное, а из возбужденного в нижележащее неосновное состояние. Вероятность данного процесса довольно низкая, и существенную роль в реализации перехода ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ играет величина высокочастотной границы колебательного спектра стеклообразной матри-

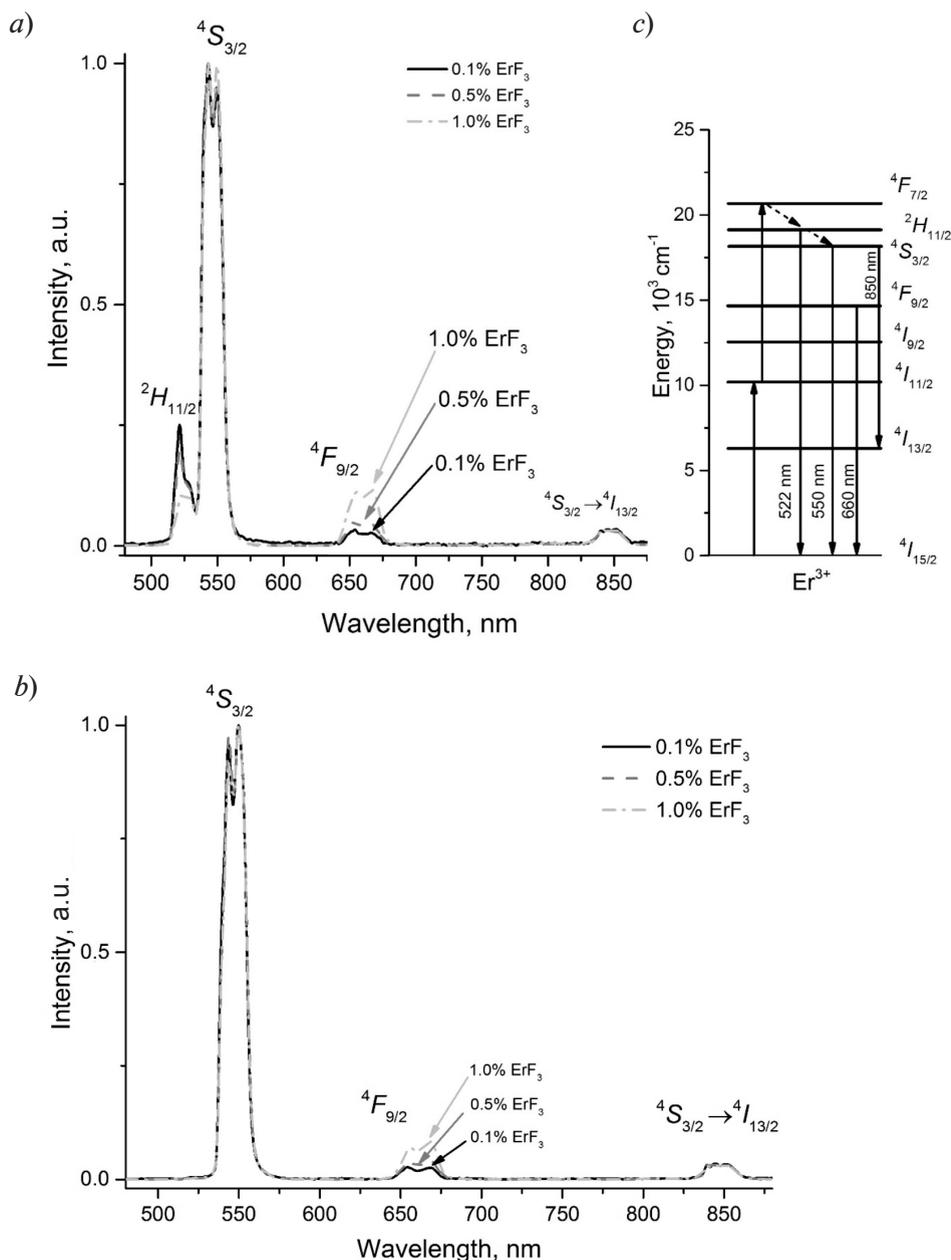


Рис. 3. Спектры апконверсионной люминесценции образцов активированного фторалюминатного стекла при 300 К (а) и 77 К (б); интенсивности люминесценции нормированы на максимум интенсивности каждого спектра; дана схема энергетических уровней иона Er³⁺ и механизм переноса энергии возбуждения (с)

цы. Необходимо отметить, что указанная полоса обнаруживается преимущественно в бескислородных стеклах, в частности фторидных [18].

Проанализируем спектры апконверсионной люминесценции, полученные при

температуре 77 К (рис. 3, б). Как и при комнатной температуре, в них присутствуют три группы полос. Положения максимумов полос люминесценции в спектре при 300 и 77 К полностью идентичны. Однако стоит отметить существенное уменьшение

интенсивности пика люминесценции в области 522 нм для всех концентраций активатора. Это явление подтверждает термическую природу заселения энергетического уровня ${}^2H_{11/2}$. При комнатной температуре уровень ${}^2H_{11/2}$ термически заселен с уровня ${}^4S_{3/2}$, но при уменьшении температуры до 77 К снижается энергия тепловых квантов, а значит и вероятность заселения уровня ${}^2H_{11/2}$. Этим можно объяснить значительное уменьшение относительной интенсивности полосы люминесценции в области 522 нм при $T = 77$ К.

Вернемся к анализу спектров люминесценции при 300 К (см. рис. 3, а). Для спектра образца 1.0 % ErF_3 характерно наименьшее значение относительной интенсивности пика люминесценции, обусловленного переходом ${}^2H_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ (522 нм), и наибольшее для перехода ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ (660 нм). Заметим, что в спектре этого образца максимальная относительная интенсивность полосы 660 нм наблюдалась как при комнатной температуре, так и при 77 К.

Данные факты можно непротиворечиво объяснить следующим образом. Увеличение концентрации активатора приводит к уменьшению среднего расстояния между оптически активными ионами и возрастанию вероятности их обменного взаимодействия, что сказывается на увеличении заселенности уровня ${}^4F_{9/2}$ и снижении относительной заселенности уровня ${}^2H_{11/2}$. Неизменная относительная интенсивность перехода ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ (850 нм) свидетельствует о том, что изменение концентрации ионов Er^{3+} не приводит к изменению механизма заселения уровня ${}^4S_{3/2}$.

Рассмотрим более подробно характеристики уровней энергии ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$. Согласно данным, полученным из спектров оптического поглощения, энергетический зазор ΔE между этими уровнями составляет примерно 770 см^{-1} . Такое низкое значение величины (существенно меньшее, чем 2000 см^{-1}) для стекол, активированных ионами Er^{3+} , приводит к тому, что относительная населенность уровней ${}^4H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$ зависит от температуры [19]. Кроме того, поскольку при комнатной температуре величина ΔE превышает энергию тепловых

квантов (около 210 см^{-1}), то полосы люминесценции с двух уровней энергии не перекрываются. В итоге вышележащий уровень ${}^2H_{11/2}$ имеет меньшую населенность оптически активных ионов, чем уровень ${}^4S_{3/2}$; таким образом, уровни ${}^2H_{11/2}$, ${}^4S_{3/2}$ оказываются термически связанными, и их относительные населенности подчиняется распределению Больцмана [19].

Именно это обстоятельство используется при создании оптических температурных датчиков, работающих по методике FIR (Fluorescence Intensity Ratio – отношение интенсивностей флуоресценции) [20]. Согласно указанной методике, необходимо, чтобы температурная зависимость отношения интенсивностей термически связанных уровней была пропорциональна относительной населенности уровней ${}^2H_{11/2}$, ${}^4S_{3/2}$ [21]:

$$\begin{aligned} \text{FIR} &= \frac{I_H}{I_S} = \frac{g_H \sigma_H \omega_H}{g_S \sigma_S \omega_S} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) = \\ &= C \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где I_H , I_S – интенсивности пиков люминесценции, связанных с переходами ${}^2H_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ и ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ соответственно; параметры σ_H , σ_S , ω_H , ω_S – сечения излучения и частоты люминесцентных переходов ${}^2H_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ и ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$; g_H , g_S – факторы вырождения уровней ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$; k_B – постоянная Больцмана, T – температура.

Для получения температурных зависимостей FIR (отношение интенсивностей) исследуемых образцов были проведены измерения апконверсионной люминесценции в области температур 77 – 300 К. Полученные экспериментальные данные приведены на рис. 4. Следует отметить, что температурная зависимость отношения пиков флуоресценции (FIR) соответствует теоретической и имеет экспоненциальный характер. Кроме того, видно, что с увеличением температуры FIR растет для всех исследованных образцов, что свидетельствует об увеличении чувствительности. Наибольшие значения FIR в исследуемом диапазоне температур демонстрирует образец с наименьшим содержанием ионов Er^{3+} – 0.1%

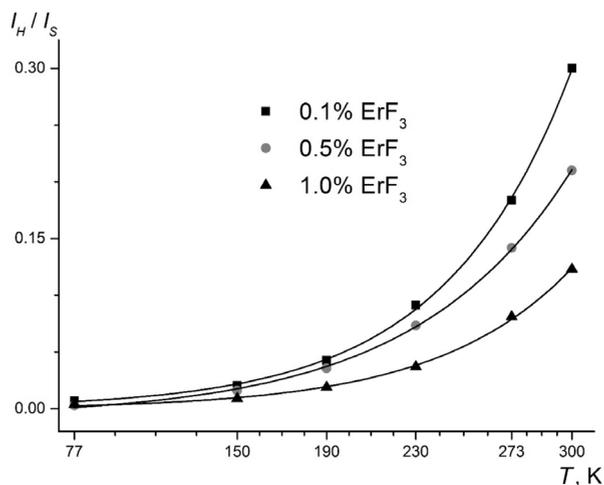


Рис. 4. Экспериментальные результаты (символы) FIR (I_H / I_S) для образцов фторалюминатных стекол с различной концентрацией активатора Er^{3+} . Сплошные линии соответствуют экспоненциальной аппроксимации в соответствии с формулой (1)

ErF_3 , что может быть связано с меньшей вероятностью обменных взаимодействий оптически активных ионов и реабсорбции излучения, которые модифицируют механизм заселения уровней ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$ [11].

Полученные результаты свидетельствуют о том, что среди исследованных образцов с концентрацией активаторной добавки ErF_3 в диапазоне 0,1 – 1,0 мол. % наиболее чувствительным к температурным изменениям является образец с минимальным содержанием ионов Er^{3+} .

Заключение

Проведено исследование спектрально-люминесцентных свойств фторалюминатных стекол состава $98\text{MgCaSrBaYAl}_2\text{F}_{14}-2\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$, активированных ионами Er^{3+} , с переменным содержанием активатора. Анализ спектров их оптического поглощения показал, что в исследуемых образцах не наблюдаются эффекты сегрегации активатора и отсутствует неоднородное уширение спектральных полос. Для наиболее интенсивных полос поглощения установлено выполнение закона Бугера – Ламберта – Бера.

Получены спектры апконверсионной

люминесценции при температурах 77 и 300 К, и на основе анализа схемы энергетических уровней иона Er^{3+} предложен механизм переноса энергии возбуждения, поясняющий природу наблюдаемых полос люминесценции в видимой и ближней ИК- областях спектра. При этом ключевым моментом для появления данных полос выступает заселение энергетического уровня ${}^4F_{7/2}$, которое происходит двумя путями: через обменное взаимодействие и поглощение энергии электромагнитного излучения из возбужденного состояния.

Выявлено влияние концентрации ионов активатора на относительную интенсивность полосы с максимумом около 660 нм, соответствующей электронному переходу ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$. Явление роста относительной интенсивности указанной полосы при увеличении концентрации активатора объяснено возрастанием вероятности обменного взаимодействия между оптически активными ионами вследствие уменьшения среднего расстояния между ионами Er^{3+} .

Отношения интенсивностей полос апконверсионной люминесценции с максимумами около 522 нм и 550 нм в области температур 77 – 300 К проанализированы с применением методики FIR. Указанные полосы соответствуют переходам с термически связанных энергетических уровней ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$ в основное состояние ${}^4I_{15/2}$. Полученные температурные зависимости отношения интенсивностей пиков флуоресценции свидетельствуют об экспоненциальном характере относительной населенности уровней ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$. Кроме того, обнаружено, что с ростом температуры для всех исследованных образцов величина FIR увеличивается и достигает своего максимального значения при 300 К. Установлено также, что при одинаковой температуре снижается отклик FIR с увеличением концентрации ионов Er^{3+} , что может быть связано с возрастающей вероятностью обменных взаимодействий между оптически активными ионами и с реабсорбцией излучения; указанные факторы приводят к модификации процесса заселения уровней ${}^2H_{11/2}$ и ${}^4S_{3/2}$.

Результаты данного исследования свидетельствуют о возможности использования активированных фторалюминатных стекол исследованного состава в качестве материала для создания чувствительного элемента в оптических температурных сенсорах, основанных на методике FIR.

В области температур 77 – 300 К, наиболее чувствительным к температурным изменениям среди исследованных образцов оказался образец с минимальным содержанием ионов Er^{3+} (0,1 %).

Возможность использования фторалюминатных стекол исследуемого состава в

области высоких температур (вплоть до 600 К) и реакция образцов на такие температурные изменения требуют дальнейшего изучения.

Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность кандидату физико-математических наук В.А. Асееву (доцент университета ИТМО) за помощь в проведении люминесцентных измерений, а также кандидату химических наук А.В. Семенча (доцент СПбПУ) за плодотворное обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Thorpe M.J., Moll K.D., Jones R.J., Safdi B., Ye J. Broadband cavity ringdown spectroscopy for sensitive and rapid molecular detection // *Science*. 2006. Vol. 311. No. 5767. Pp. 1595–1599.
2. West G.F., Höfle W. Spectral attenuation of fluoride glass fibers // *J. Non-Cryst. Solids*. 1997. Vol. 213–214. Pp. 189–192.
3. Khamis M.A., Ennsner K. Design of highly efficient Pr^{3+} -doped chalcogenide fiber laser // *IEEE Photonics Technology Letters*. 2017. Vol. 29. No. 18. Pp. 1580–1583.
4. Chen H., Chen F., Wei T., Liu Q., Shen R., Tian Y. Ho^{3+} -doped fluorophosphate glasses sensitized by Yb^{3+} for efficient 2 μm laser applications // *Opt. Commun.* 2014. Vol. 321. Pp. 183–188.
5. Paul M.C., Bysakh S., Das Sh., et al. Recent developments in rare-earths-doped nano-engineered glass based optical fibers for high power fiber lasers // *Trans. Ind. Ceram. Soc.* 2016. Vol. 75. No. 4. Pp. 195–208.
6. Tang G., Yang Z., Luo L., Chen W. Dy^{3+} -doped chalcogenide glass for 1.3- μm optical fiber amplifiers // *J. Mater. Res.* 2008. Vol. 23. No. 4. Pp. 954–961.
7. Fu J., Kobayashi M., Sugimoto S., Parker J.M. Eu^{3+} -activated heavy scintillating glasses // *Mater. Res. Bull.* 2008. Vol. 43. No. 6. Pp. 1502–1508.
8. Haouari M., Maaoui A., Saad N., Bulou A. Optical temperature sensing using green emissions of Er^{3+} -doped fluoro-tellurite glass // *Sensors and Actuators. A : Physical*. 2017. Vol. 261. Pp. 235–242.
9. Cai Z., Hue-Yin Xu, Yang S.L., Feron P., Stephan G.M., Mortier M. Micrometer-sized point temperature sensor in Er: ZBLALiP // *Proc. SPIE*. 2002. Vol. 4919. No. (20 Sept). Pp. 501–507.
10. Brites C.D.S., Lima P.P., Silva N.J.O., Millán A., Amaral V.S., Palacio F., Carlos L.D. Thermometry at the nanoscale // *Nanoscale*. 2012. Vol. 4. No. 16. Pp. 4799–4829.
11. León-Luis S.F., Rodríguez-Mendoza U.R., Haro-González P., Martín I.R., Lavín V. Role of the host matrix on the thermal sensitivity of the Er^{3+} luminescence in optical temperature sensors // *Sensors and Actuators. B: Chemical*. 2012. Vol. 174. Pp. 176–186.
12. Сироткин С.А., Сысоев Д.С., Бочарова Т.В., Зиатдинов А.М., Клинков В.А., Лобода В.В., Тагильцева Н.О. Спектроскопические свойства стекол фторалюминатных систем с малыми добавками метафосфата бария, активированных ионами редкоземельных элементов // *Физика и химия стекла*. 2015. Т. 41. № 3. С. 357–365.
13. Klinkov V.A., Semencha A.V., Tsimerman E.A. Advanced materials for fiber communication systems // *Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. 17th Intern. Conf. Russia. St. Petersburg, Aug. 28 –30, 2017. Proc. Springer*, Pp. 184–195.
14. Dieke G.H., Satten R.A. Spectra and energy levels of rare earth ions in crystals // *Amer. J. Phys.* 1970. Vol. 38. No. 3. Pp. 399–400.
15. Дмитриук А.В., Карапетян Г.О., Максимов Л.В. Сегрегация активатора и ее спектроскопические следствия // *Журнал прикладной спектроскопии*. 1975. Т. 22. № 1. С. 153–182.
16. Ландсберг Г.С. *Оптика*. М.: Наука, 1976. 567 с.
17. Малов А.В., Марычев М.О., Рябочкина П.А., Сомов Н.В., Ушаков С.Н., Чупрунов Е.В. Спектроскопические и структурные свойства кристаллов кальций-ниобий-галлиевого граната, активированных ионами Er^{3+} // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского*. 2008. № 6. С. 46–52.
18. Catunda T., Nunes L.A.O., Florez A.,



Messaddeq Y., Aegerter M.A. Spectroscopic properties and upconversion mechanisms in Er³⁺-doped fluorindate glasses // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. No. 10. Pp. 6065–6070.

19. Maurice E., Baxter G., Monnom G., Dussardier B., Saïssy A., Ostrowsky D.B. Thermalization effects between upper levels of green fluorescence in Er-doped silica fibers // Opt. Lett.

1994. Vol. 19. No. 13. Pp. 990–992.

20. Rai V.K. Temperature sensors and optical sensors // Appl. Phys. B. 2007. Vol. 88. No. 2. Pp. 297–303.

21. Rai V.K., Rai S.B. A comparative study of FIR and FL-based temperature sensing schemes: an example of Pr³⁺ // Appl. Phys. B. 2007. Vol. 87. No. 2. Pp. 323–325.

Статья поступила в редакцию 19.01.2018, принята к публикации 30.01.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

КЛИНКОВ Виктор Артемович – аспирант Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
klinkovvictor@yandex.ru

REFERENCES

[1] M.J. Thorpe, K.D. Moll, R.J. Jones, et al., Broadband cavity ringdown spectroscopy for sensitive and rapid molecular detection, Science. 311 (5767) (2006) 1595–1599.

[2] G.F. West, W. Höfle, Spectral attenuation of fluoride glass fibers, J. Non-Cryst. Solids. 213–214 (1997) 189–192.

[3] M.A. Khamis, K. Ennsner, Design of highly efficient Pr³⁺-doped chalcogenide fiber laser, IEEE Photonics Technology Letters. 29 (18) (2017) 1580–1583.

[4] H. Chen, F. Chen, T. Wei, et al., Ho³⁺-doped fluorophosphate glasses sensitized by Yb³⁺ for efficient 2 μm laser applications, Opt. Commun. 321 (2014) 183–188.

[5] M.C. Paul, S. Bysakh, Sh. Das, et al., Recent developments in rare-earths doped nano-engineered glass based optical fibers for high power fiber lasers, Trans. Ind. Ceram. Soc. 75 (4) (2016) 195–208.

[6] G. Tang, Z. Yang, L. Luo, W. Chen, Dy³⁺-doped chalcogenide glass for 1.3-μm optical fiber amplifiers, J. Mater. Res. 23 (4) (2008) 954–961.

[7] J. Fu, M. Kobayashi, S. Sugimoto, J.M. Parker, Eu³⁺-activated heavy scintillating glasses, Mater. Res. Bull. 43 (6) (2008) 1502–1508.

[8] M. Haouari, A. Maaoui, N. Saad, A. Bulou, Optical temperature sensing using green emissions of Er³⁺ doped fluoro-tellurite glass, Sensors and Actuators, A: Physical. 261 (2017) 235–242.

[9] Z.P. Cai, Hue-Yin Xu, S.L. Yang, et al., Micrometer-sized point temperature sensor in Er: ZBLALiP, Proc. SPIE. 4919 (20 Sept.) (2002) 501–507.

[10] C.D.S. Brites, P.P. Lima, N.J.O. Silva, et al., Thermometry at the nanoscale, Nanoscale. 4 (2014) 4799–4829.

[11] S.F. León-Luis, U.R. Rodríguez-Mendoza, P. Haro-González, et al., Role of the host matrix on the thermal sensitivity of the Er³⁺ luminescence in optical temperature sensors, Sensors and Actuators. B: Chemical. 174 (2012) 176–186.

[12] S.A. Sirotkin, D.S. Sysoev, T.V. Bocharova, et al., Spectroscopic properties of the glass of fluoroaluminate systems with small additives of barium metaphosphate activated with the ions of rare-earth elements, Glass Phys. Chem. 41 (3) (2015) 265–271.

[13] V.A. Klinkov, A.V. Semencha, E.A. Tsimerman, Advanced materials for fiber communication systems, Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems, 17th Intern. Conf., Russia, St. Petersburg, Aug. 28–30, 2017. Proc., Springer, Pp. 184–195.

[14] G.H. Dieke, R.A. Satten, Spectra and energy levels of rare earth ions in crystals, Am. J. Phys. 38 (3) (1970) 399–400.

[15] A.V. Dmitryuk, G.O. Karapetyan, L.V. Maksimov, Phenomenon of activator segregation and its spectroscopic consequences, J. Appl. Spectroscopy. 22 (1) (1975) 119–141.

[16] G.S. Landsberg, Optika [Optics], Moscow, Nauka, 1976.

[17] A.V. Malov, M.O. Marychev, P.A. Ryabochkina, et al., Spektroskopicheskiye i strukturnyye svoystva kristallov kaltsiy-niobiy-galliyevogo granata, aktivirovannykh ionami Er³⁺ [Spectroscopic and structural properties of Er³⁺-doped calcium-niobium-gallium garnet crystals], Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo. (6) (2008) 46–52.

[18] T. Catunda, L.A.O. Nunes, A. Florez, et al., Spectroscopic properties and upconversion

mechanisms in Er³⁺-doped fluorindate glasses, Phys. Rev. B. 53 (10) (1996) 6065–6070.

[19] E. Maurice, G. Baxter, G. Monnom, et al., Thermalization effects between upper levels of green fluorescence in Er-doped silica fibers, Opt. Lett. 19 (13) (1994) 990–992.

[20] V.K. Rai, Temperature sensors and optical sensors, Appl. Phys. B. 88 (2) (2007) 297–303.

[21] V.K. Rai, S.B. Rai, A comparative study of FIR and FL based temperature sensing schemes: an example of Pr³⁺, Appl. Phys. B. 87 (2) (2007) 323–325.

Received 19.01.2018, accepted 24.01.2018.

THE AUTHOR

KLINKOV Victor A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

klinkovvictor@yandex.ru



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.18721/JPM.111106

УДК 532.528

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАВИТАЦИИ В ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ТЕЧЕНИЯХ В КАНАЛАХ

И.И. Исаенко¹, А.В. Махнов¹, Е.М. Смирнов¹, А.А. Шмидт^{1,2}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе сформулирована модель кавитирующих течений, в которой используется лагранжево-эйлеровское описание многофазной среды и где учитывается гетерогенный механизм образования кавитационных пузырей. Для моделирования их роста и схлопывания применяется уравнение Рэлея – Плессе, дополненное уравнениями межфазного переноса массы и энергии, определяющими их внутренние параметры. Разработанная модель обеспечивает качественное совпадение формы кавитационной каверны и положения ее задней границы с экспериментальными наблюдениями.

Ключевые слова: высокоскоростное течение; кавитация; уравнение Рэлея – Плессе; многофазная среда

Ссылка при цитировании: Исаенко И.И., Махнов А.В., Смирнов Е.М., Шмидт А.А. Моделирование кавитации в высокоскоростных течениях в каналах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 55 – 65. DOI: 10.18721/JPM.111106

SIMULATION OF HIGH-SPEED CAVITATING FLOWS IN CHANNELS

I.I. Isaenko¹, A.V. Makhnov¹, E.M. Smirnov¹, A.A. Schmidt²

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

²Ioffe Institute of the Russian Academy of Science, St. Petersburg, Russian Federation

Cavitation is a process of vapour and gas bubbles formation in a liquid flow. It occurs when a flow pressure drops below a certain level depending on liquid's physical properties and its temperature. One of the important factors of cavitation is the presence of unsolved microscopic bubbles filled with gas and/or vapour in real liquids. These bubbles, or nucleation sites, evolve under pressure drops that are sufficient for evaporation of surrounding liquid.

A model of cavitating flows based on Euler – Lagrange description of multiphase medium has been developed. It took into account heterogeneous nature of cavitation bubbles formation. The Rayleigh – Plesset equation along with interphase mass and energy transfer equations were used to simulate bubbles evolution. The developed model provides qualitatively accurate prediction of cavity shape and its borders position in comparison with the experimental data.

Key words: high-speed flow; cavitation; Rayleigh–Plesset equation; multiphase medium

Citation: I.I. Isaenko, A.V. Makhnov, E.M. Smirnov, A.A. Schmidt, Simulation of high-speed cavitating flows in channels, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 55 – 65. DOI: 10.18721/JPM.111106

Введение

Кавитация, т. е. образование в жидкости полостей (пузырьков, каверн), заполненных паром или парогазовой смесью, — это фундаментальная проблема, которая представляет неизменный интерес в связи с развитием теории многофазных сред и огромным числом ее приложений [1]. Явление кавитации возникает при падении давления ниже определенного уровня, зависящего от свойств жидкости и ее температуры [2 – 6]. Большую роль при этом играет возможное присутствие в жидкости микроскопических включений (пузырьков и твердых частиц), т. е. «зародышей», или ядер кавитации.

При повышении давления в кавитирующей среде, каверны (пузырьки) коллапсируют, в результате чего могут образовываться ударные волны и высокоскоростные кумулятивные струйки, которые вызывают кавитационную эрозию.

Изучение кавитации имеет большое практическое значение, ввиду широкой распространенности этого явления. Исследования охватывают широкий круг вопросов: от задач физиологии (например, вскипание крови при понижении давления [1]) до проблем проектирования энергетического и транспортного оборудования (гидротурбины, насосы, гребные винты, насосы, клапаны и т. п.) [3 – 4, 7], а также развития технологий, использующих эффекты энерговыделения в жидкости [2, 8 – 9].

Эрозия, которая сопутствует развитию кавитации, может сильно влиять на функционирование соответствующих устройств, поскольку приводит к снижению их производительности, вплоть до разрушения. Поэтому изучение эрозии также вызывает большой интерес для фундаментальных и прикладных исследований.

Следует заметить, что экспериментальное изучение кавитации сталкивается с большими трудностями, связанными с экстремальными значениями ее параметров и различными пространственно-временными масштабами исследуемых процессов. В этих

условиях математическое моделирование становится перспективным и эффективным инструментом изучения кавитации [7 – 9].

Предлагаемая статья посвящена анализу одного из возможных подходов к математическому моделированию кавитации.

Математическая модель течений кавитирующей жидкости

Основными подходами к моделированию течений многофазных сред являются эйлеровско-эйлеровское и лагранжево-эйлеровское описания [10].

В первом случае исследуемая гетерогенная среда заменяется квазигомогенной смесью, имеющей непрерывные (континуальные) распределения плотностей, скоростей, давлений и других параметров фаз. При этом обе фазы (несущая жидкость и пузыри) в этой модели занимают весь объем смеси, и вводится понятие объемной доли фазы; это позволяет определить фиктивные плотности компонентов квазигомогенной смеси и использовать систему уравнений Навье – Стокса при расчетах течений с кавитацией.

Однако для этих моделей не характерен учет физики процессов эволюции пузырей, образующихся при кавитации, а это в ряде случаев может быть ключевым фактором.

В рамках второго подхода движение несущей фазы определяется уравнениями динамики сплошной среды, а для описания движения дисперсной фазы (в частности, пузырьков) используется подход Лагранжа, основанный на введении набора пробных частиц. Расчет течений многофазной среды включает при этом следующие основные этапы:

решение уравнений несущей фазы (Эйлеров этап);

решение уравнений движения пробных частиц в соответствии с полем течения несущей фазы, полученным на предыдущем этапе (уравнений Лагранжева этапа);

решение уравнений межфазного переноса для учета влияния дисперсной фазы на несущую;

уточнение поля течения несущей фазы с учетом влияния дисперсной фазы (новый шаг по времени в рамках Эйлера этапа).

Второй подход требует значительных вычислительных затрат, однако позволяет проводить расчет динамики каждой пробной частицы (пузыря) индивидуально, а также учитывать неоднородность их распределения по размерам, в отличие от эйлеровско-эйлеровской модели, которая усредняет их поведение. Благодаря этому преимуществу развитие методов лагранжево-эйлеровского описания представляется наиболее целесообразным.

На эйлеровском этапе движение несущей фазы описывается системой уравнений Навье – Стокса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) &= 0; \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) &= -\nabla P + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_v \rho_v) + \nabla \cdot (\alpha_v \rho_v \mathbf{V}) = S_v - S_l,$$

где ρ , кг/м³ – плотность смеси; $\rho = \rho_l \alpha_l + \rho_v \alpha_v$ (α – объемная доля вещества, индексы l и v относятся к жидкости и пару, соответственно); \mathbf{V} , м/с – вектор скорости; P , Па – давление; S , кг/м³·с – источниковые члены (плотности распределения массовых источников, индексы l и v также относятся к жидкости и пару, соответственно); τ_{ij} – компоненты тензора напряжений.

На Лагранжевом этапе рассчитывается перемещение пузырей в поле скорости с учетом или без учета массовых сил:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (2)$$

где $\mathbf{X} = [x; y; z]$, $\mathbf{F} = [V_x; V_y; V_z]$ (V_i – компоненты скорости).

Затем решается система уравнений, основанных на законах сохранения массы и энергии:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi R_B^3 \rho_v \right) = 4\pi R_B^2 \dot{m}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi R_B^3 \rho_v U_B \right) &= \\ &= -P_B \frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi R_B^3 \right) - 4\pi R_B^2 U_{12}, \end{aligned} \quad (4)$$

где R_B – радиус кавитационного пузырька; m – масса; U_B – внутренняя энергия кавитационного пузырька; P_B , Па – давление пара в кавитационном пузырьке; U_{12} – поток энергии через поверхность раздела фаз.

Систему (3), (4) можно преобразовать к следующему виду, пригодному для непосредственного определения параметров пара внутри пузырька [9, 19]:

$$\begin{aligned} \frac{dP_B}{dt} &= P_B \left[\frac{1}{T_B} \frac{dT_B}{dt} - \frac{3}{R_B} \left[\frac{dR_B}{dt} - \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{\eta_{ac} T_B}{P_B} \frac{\sqrt{r_v}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{P_s(T_l)}{\sqrt{T_l}} - \frac{P_B}{\sqrt{T_B}} \right) \right] \right]; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_B}{dt} &= -3 \frac{T_B}{R_B P_B} \left[(\gamma - 1) \left(P_B + \frac{2\Sigma}{R_B} \right) \frac{dR_B}{dt} + \right. \\ &\left. + \eta_{ac} P_s(T_l) (T_B - T_l) \sqrt{\frac{r_v}{2\pi T_l}} \right], \end{aligned} \quad (6)$$

где P_s , Па – давление насыщенного пара; T_l , T_B , К – температуры жидкости и газа в пузырьке, соответственно; η_{ac} – коэффициент аккомодации; r_v – удельная газовая постоянная; Σ , Н/м – коэффициент поверхностного натяжения; γ – показатель адиабаты газа.

Коэффициент аккомодации η_{ac} равен 0,04 в случае воды, удельная газовая постоянная $r_v = P_v / \rho_v T_v M_v$ (T_v – температура пара, M_v – молярная масса газа в пузырьке), показатель адиабаты газа $\gamma = 1,4$.

Уравнения (5), (6) дополняются уравнением динамики радиального движения пузырька в форме Рэлея – Плессе [11, 12]:

$$\begin{aligned} R_B \frac{d^2 R_B}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{dR_B}{dt} \right)^2 &= \\ &= \frac{1}{\rho_l} \left(P_B - P_\infty - \frac{4\mu}{R_B} \frac{dR_B}{dt} - \frac{2\Sigma}{R_B} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где P_∞ , Па — давление внешнего потока; μ , Па·с — динамическая вязкость.

Это уравнение описывает рост и сжатие сферически симметричного пузырька пара с учетом инерции при радиальном движении окружающей жидкости, разностью внутреннегo и внешнего давлений ($P_B - P_\infty$), а также вязкостью и поверхностным натяжением. Процессы диффузии газа в работе не учитываются.

Подходы к описанию возникновения кавитации

Большинство моделей кавитационных течений используют эйлера-эйлеровское описание двухфазной среды. В их основе могут лежать баротропные уравнения состояния среды [18], термодинамические соотношения [17] или уравнения связи между источниковыми членами S , ответственными за межфазный массоперенос, и динамикой роста и сжатия пузырей [16, 17]. В работах [13, 14, 16] рассматривается задача об обтекании крылового профиля НАСА-66, для которой имеется экспериментальная информация [15].

В работе [17] предложен ряд моделей кавитации, основанных на термодинамических соотношениях для фазовых переходов. Простейшая из них основана на предположении о равновесии фаз и числе ядер кавитации, достаточном для пренебрежения временем метастабильного состояния, что справедливо в случаях простых течений. Там же рассмотрен ряд более сложных дифференциальных моделей, учитывающих метастабильность, теплообмен при фазовых переходах, наличие пузырьков нерастворенного газа и некоторые другие факторы. Модели, использующие эйлера-эйлеровское описание, дают качественно сходные распределения паросодержания и адекватно предсказывают размеры каверны. Однако они не отражают физику процессов парообразования и конденсации, так как используют допущение, что парообразование происходит строго при достижении давления насыщения (объемное содержание газовых пузырьков в смеси предполагается достаточным для пренебрежения временем задержки фазового перехода). К недостат-

кам данного подхода следует также отнести зависимость результатов моделирования от значений эмпирических параметров, входящих в уравнения; в связи с этим требуется их дополнительная подстройка [16, 17].

В последние годы различными исследовательскими группами были выполнены расчеты кавитационных течений с использованием лагранжево-эйлеровского описания. В работе [19] выполнен расчет кавитационного облака с помощью Лагранжева метода моделирования динамики дискретных пузырьков. Несущая фаза представлена квазигомогенной смесью с переменным непрерывным распределением плотности, удовлетворяющим законам сохранения массы и импульса. Рост и сжатие пузырьков моделировались с помощью уравнения Келлера — Герринга (модификация уравнения Рэля — Плессе). На основании данных о расположении пузырьков и их размерах рассчитывалась объемная доля пара, для перевода дискретного распределения пузырей в объеме в сплошное поле плотности смеси была использована функция гауссовского распределения.

В этих работах использованы данные по наблюдаемым в жидкостях микрочастицам (микропузырькам), которые служат ядрами («зародышами») кавитации. Согласно экспериментальным данным работы [4], в одном кубическом метре дистиллированной воды содержится около $10^{11} - 10^{12}$ зародышей, а их характерные радиусы лежат

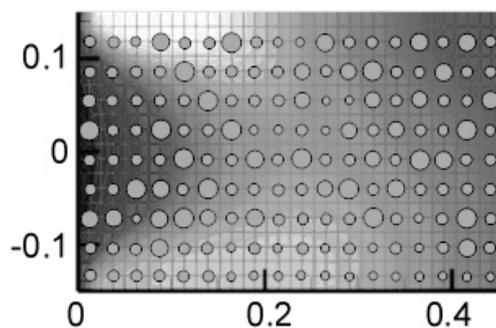


Рис. 1. Расчетная схема распределения пробных пузырей в поле несущей среды на основе экспериментальных данных работы [4]

в пределах от 1 до 6 мкм (рис. 1). Присутствие этих зародышей обеспечивает возникновение гетерогенной нуклеации и развитие кавитационных пузырей [20]. Основой формирования ядер кавитации служат те частицы или неоднородности поверхности, размер (радиус) которых превышает критическое значение R_{cr} , определяемое из соотношения Лапласа:

$$R_{cr} = \frac{2\Sigma}{P_s - P_l}, \quad (8)$$

где индексы s и l относятся соответственно к давлению насыщенного пара и давлению в потоке жидкости.

В настоящей работе использована методика расчета течений с кавитацией, основанная на лагранжево-эйлеровском описании двухфазной среды и упрощенной модели гетерогенной нуклеации, в которой центрами парообразования являются только присутствующие в жидкости паровые пузыри (другие факторы, такие как наличие пузырьков воздуха, твердых примесей и шероховатости поверхности не учитываются).

Лагранжево-эйлеровский алгоритм расчетов течения кавитирующих сред

На каждом временном шаге в рамках эйлеровского этапа алгоритма определя-

ются поля скорости и давления несущей среды, которые используются в качестве исходных данных для выполнения Лагранжева этапа расчетов. На первом шаге происходит «засеивание» расчетной области пробными пузырями (см. рис. 1).

В настоящей работе начальное распределение пузырей в жидкости задается в соответствии с экспериментальными данными из работы [4]. При этом распределение кавитационных ядер по размерам заменяется кусочно-постоянной функцией; N_B – количество ядер с радиусом R_B (рис. 2).

На Лагранжевом этапе алгоритма проводится расчет движения и изменения размеров пробных пузырьков. При этом выполняется интерполяция полей несущей фазы по схеме, приведенной на рис. 3, *a*, для определения параметров в точке расположения пузырька. Рост пробных пузырей описывается системой уравнений (5) – (7).

После обработки всех имеющихся пробных пузырей производится расчет объемного паросодержания с учетом числа пузырей, попавших в каждый контрольный объем, и расчет численной плотности (вероятность нахождения) пузырьков данного сорта в единице объема (контрольном объеме). Используется схема трансляции значений из точек расположения пузырьков в ближайшие узлы вспомогательной расчетной сетки (рис. 3, *b*). Такой подход обеспечивает не-

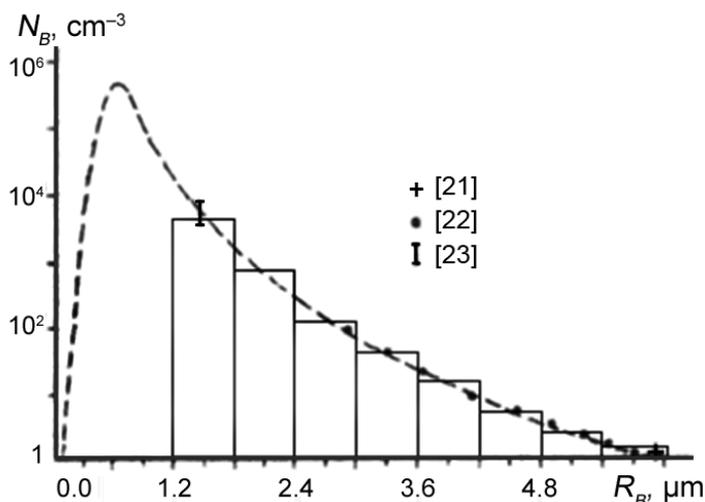


Рис. 2. Аппроксимация спектра кавитационных ядер (пунктирная линия) кусочно-постоянной функцией (сплошные линии)

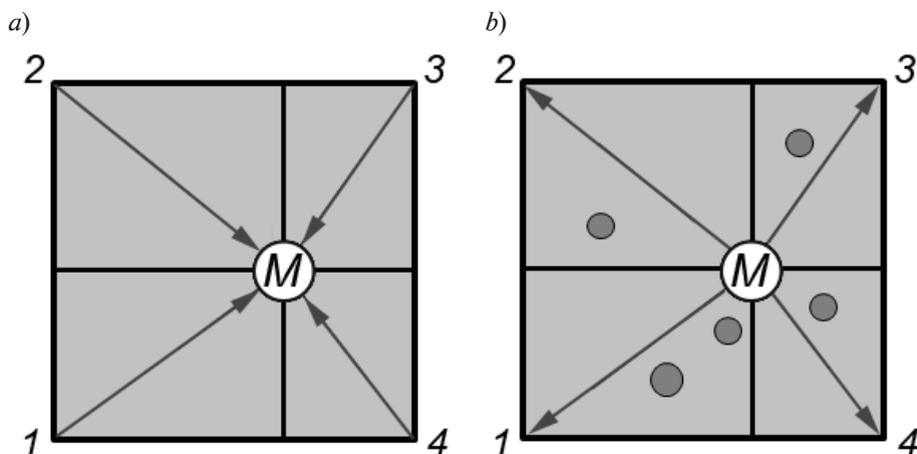


Рис. 3. Схема, поясняющая связь лагранжевого и эйлеровского этапов алгоритма расчета:
 а – интерполяция гидродинамических переменных из узлов сетки 1 – 4 в точку расположения пузырька M ,
 б – передача информации о паросодержании в узлы сетки 1 – 4

прерывность поля объемного паросодержания. По полученным значениям объемной доли пара корректируется поле плотности, после чего выполняются поправки для учета закона сохранения массы, и происходит переход к эйлеровскому этапу для нового шага по физическому времени.

При движении и росте пузырьков возможно их взаимодействие друг с другом и слияние. Слияние и дробление пузырьков в данной работе не учитывается. Вместо этого вводится условная граница между режимами пузырьковой кавитации и каверны, определяемая значением объемного паросодержания α_v . В последнем случае в области, где кавитация считается развитой (с высокими значениями α_v), а внутренние параметры пузырьков заморожены, возможно применение эйлера-эйлеровского описания. Такая гибридная модель сохраняет преимущества Лагранжева описания динамики дискретных пузырьков в случаях пузырьковой кавитации; в то же время эта модель избавляет исследователя от необходимости проведения трудоемких расчетов параметров каждого пузырька в областях с развитой кавитацией.

Введенные допущения позволяют упростить реализацию метода, поскольку отпадает надобность моделировать дробление каверны и слияние отдельных пузырьков, сохраняя их число постоянным. При этом

каверна представляется в виде искусственного плотного «облака» кавитационных пузырьков.

Тестирование модели

При моделировании процесса кавитации рассмотрены следующие задачи:

1. Эволюция одиночного пузыря при синусоидальных колебаниях давления жидкости (акустическая кавитация):

$$P(t) = P_0 + (P_{\max} - |P_{\min}|) \sin(2\pi t/t_{\text{per}}), \quad (9)$$

где P_0 , P_{\max} , P_{\min} – средняя, максимальная и минимальная величины давления; t_{per} – период колебаний давления.

2. Течение в узком канале переменного сечения (рис. 4), причем рассмотрен такой же канал, какой приведен в работе [7].

Применение лагранжево-эйлеровского описания в данном случае сопряжено с рядом трудностей. Одна из них относится к пространственным масштабам, а именно – характерные размеры расчетных ячеек сравнимы с размерами кавитационных пузырьков, поэтому необходимо либо вводить дополнительные огрубленные сетки, либо строить специальные схемы для учета влияния распределения пузырьков. В рассмотренных масштабах количество пузырьков в единице объема может оказаться меньше одного; в этом случае величина должна выражать вероятность нахождения пузыря в

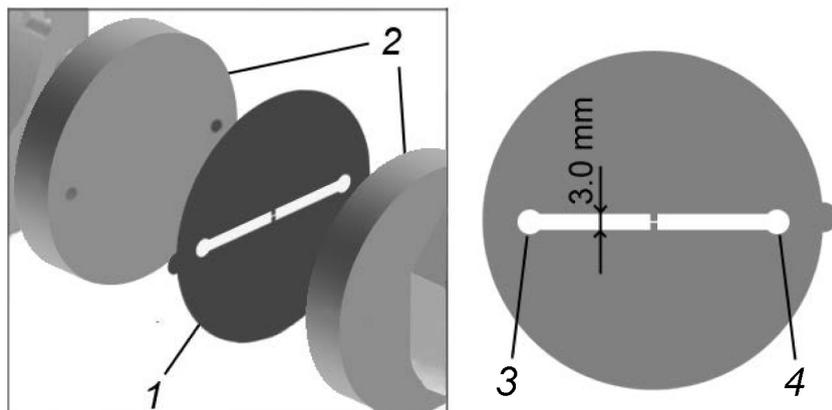


Рис. 4. Схема экспериментальной установки для имитации течения в инжекторе [7]:
 1 – пластинка с каналом, 2 – окна подачи и отвода жидкости, 3 – вход в канал, входное давление $P_{in} = 300$ атм, 4 – выход из канала, выходное давление $P_{out} = 52$ атм

данном (контрольном) объеме.

Эйлеровский этап численного решения выполнен нами с использованием солверов, входящих в состав открытой вычислительной среды OpenFOAM; Лагранжев этап проведен с использованием специально разработанного программного модуля.

На рис. 5 показаны графики роста одиночного пузыря с начальным радиусом $R_B = 2$ мкм при амплитуде колебаний давления $\Delta P = 200$ атм и разных значениях температуры среды. Видно, что в момент

второго падения давления схлопывающиеся пузыри возобновляют рост. Влияние разницы температур несущей среды оказывается наиболее заметным, если сравнивать данные расчетов при температурах 30°C и свыше 60°C . В случае более высоких температур рост пузырей начинается раньше, соответственно они набирают сравнительно большую массу и инерцию, и их коллапс происходит с задержкой. Это приводит к задержке возобновления роста, и в итоге, к моменту третьего подъема давления пу-

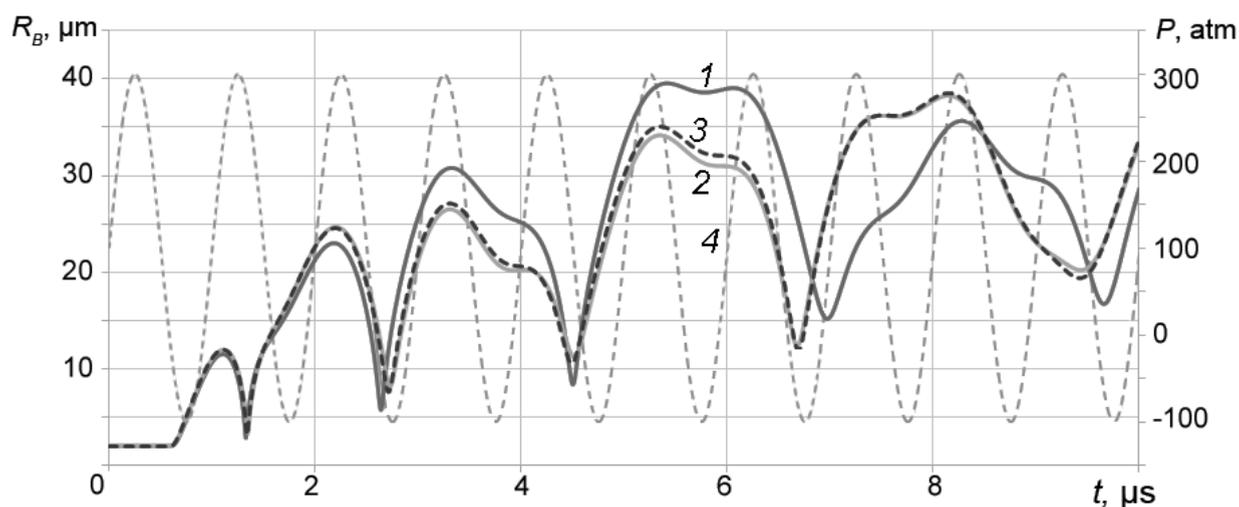


Рис. 5. Динамика роста одиночного пузыря при разных значениях температуры среды, $^\circ\text{C}$: 30 (кривая 1), 60 (2), 90 (3); приведены колебания давления среды (кривая 4).
 Начальный радиус пузыря – 2 мкм

зыри в более нагретой жидкости вырастают до меньшего объема, чем при температуре 30 °С. Дальнейшая их динамика обусловлена влиянием двух основных факторов: инерцией пузырька и колебаниями внешнего давления. Отметим, что при расчетах с использованием одиночного уравнения Рэлея – Плессе, данного эффекта не наблюдается: пузырь исчезает после первого периода восстановления давления.

Таким образом, учет изменения внутренних параметров на этапе коллапса пузыря оказывается более важным, чем на этапе роста, где, согласно нашим результа-

там, несущественна зависимость динамического поведения процесса от применяемой для его описания модели.

Сделанные выводы о применимости различных уравнений динамики пузыря позволяют составить схему расчета более сложных задач о течениях с кавитацией. При первоначальном расширении пузырей и формировании каверн, в расчетах можно пренебрегать изменениями внутренних параметров пузыря, поскольку на этом этапе их учет не вносит существенного вклада в динамику его роста.

Таким образом, в рамках данной модели рассматриваются следующие состояния пробного пузыря:

- кавитационное ядро;
- первичный рост пузыря;
- часть области каверны;
- схлопывающийся пузырь;

прекращение его существования в результате коллапса / соударения со стенкой / выход за пределы расчетной области.

На рис. 6 приведено сравнение полученного распределения объемного паросодержания в момент времени $t = 60$ мкс с результатами расчетов, где применялся решатель `cavitatingFoam`, и с осредненными экспериментальными данными, представленными в работе [7]. Результаты, полученные с помощью лагранжево-эйлеровского способа моделирования динамики пробных пузырей, хотя и являются несколько завышенными, но оказываются ближе к осредненным экспериментальным результатам [7]. В обоих случаях кавитационная каверна распространяется за пределы узкой части канала. В расчетах с использованием эйлера-эйлеровского подхода интенсивность парообразования занижена вследствие специфических особенностей модели.

Заключение

В данной работе сформулирована модель кавитирующего течения, которая учитывает эволюцию кавитационных пузырей. Применяется лагранжево-эйлеровское описание среды с учетом гетерогенного механизма образования пузырей. Моделирование их роста и схлопывания осуществлено с

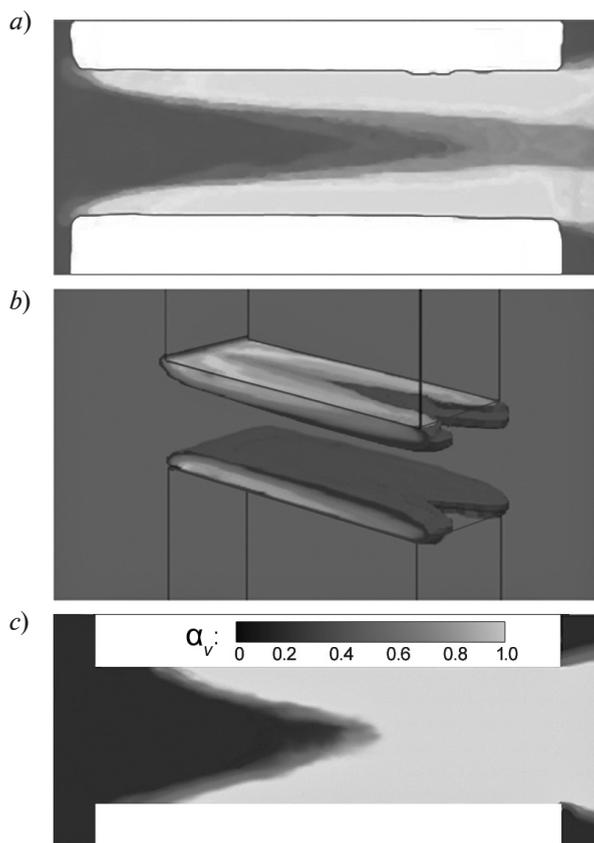


Рис. 6. Формы кавитационной каверны, полученные экспериментальным (a) и расчетными (b, c) путями.

Экспериментальные данные [7] относятся к моменту выхода каверны за пределы канала ($t = 60$ мкс), $T = 326$ К, $P_{out} = 52$ атм. Представлены результаты модельных расчетов течений, выполненных в соответствии с эйлеровско-эйлеровским (b) и лагранжево-эйлеровским (c) описаниями

использованием уравнения Рэлея – Плессе и уравнений межфазного переноса массы и энергии, определяющими их внутренние параметры.

Разработанная модель обеспечивает качественное совпадение формы каверны и положения ее задней границы с экспериментальными наблюдениями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Пирсол И.** Кавитация. Пер. с англ. М.: Мир, 1975. 95 с.
2. **Кедринский В.К.** Гидродинамика взрыва. Эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 434 с.
3. **Гегузин Я.Е.** Пузыри. М.: Наука, 1985. 173 с.
4. **Перник А.Д.** Проблемы кавитации. 2-е изд. Л.: Судостроение, 1966. 439 с.
5. **Кнэпп Р., Дейли Дж., Хэммит Ф.** Кавитация. Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 687 с.
6. **Franc J.-P., Michel J.-M.** Fundamentals of cavitation. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004. 306 p.
7. **Skoda R., Iben U., Morozov A., Mihatsch M., Schmidt S.J., Adams N.A.** Numerical simulation of collapse induced shock dynamics for the prediction of the geometry, pressure and temperature impact on the cavitation erosion in micro channels. // WIMRC 3rd International Cavitation Forum 2011, University of Warwick, UK. July 4 – 6, 2011. Pp. 1–10.
8. **Petrov N.V., Schmidt A.A.** Effect of a bubble nucleation model on cavitating flow structure in rarefaction wave // Shock Waves. 2017. Vol. 27. No. 4. Pp. 635–639.
9. **Petrov N.V., Schmidt A.A.** Multiphase phenomena in underwater explosion // Exp. Therm. Fluid Sci. 2015. Vol. 60. Pp. 367–373.
10. **Sokolichin A., Eigenberger G., Lapin A., Lübert A.** Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows: Euler/Euler versus Euler/Lagrange // Chemical Eng. Science. 1997. Vol. 52. No. 4. Pp. 611–626.
11. **Lord Rayleigh.** VIII. On the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity // Philosophical Magazine. 1917. Ser. 6. Vol. 34. No. 200. Pp. 94–98.
12. **Plesset M., Prosperetti A.** Bubble dynamics and cavitation // Ann. Rev. Fluid Mech. 1977. Vol. 9. Pp. 145–185.
13. **Frikha S., Coutier-Delgosha O., Astolfi J.A.** Influence of the cavitation model on the simulation of cloud cavitation on 2D foil section // Intern. J. of Rotating Machinery. 2008. Vol. 2008. Article ID 146234. 12 p.
14. **Гаврилов А.А., Дектерев А.А., Финников К.А.** Моделирование кавитационных течений с использованием RANS подхода // Труды 4-й Рос. нац. конф. по теплообмену (РНКТ-4). М.: Изд-во МЭИ, 2006. Т. 5. С. 241–244.
15. **Shen Y., Dimotakis P.** The influence of surface cavitation on hydrodynamic forces // Proceedings of the 22nd American Towing Tank Conference. St. John's, Canada. August 1989. Pp. 44–53.
16. **Bakir F., Rey R., Gerber A.G., Belamri T., Hutchinson B.** Numerical and experimental investigations of the cavitating behavior of an inducer // International Journal of Rotating Machinery. 2004. Vol. 10. No. 1. Pp. 15–25.
17. **Iben U.** Modeling of cavitation // Systems Analysis, Modeling and Simulation (SAMS). 2002. Vol. 42. Pp. 1283–1307.
18. **Schmidt D.P., Rutland C.J., Corradini M.L.** A fully compressible, two-dimensional model of small, high speed, cavitating nozzles // Atomization and Sprays. 1999. Vol. 9. No. 3. Pp. 255–276.
19. **Ma J., Hsiao C.-T., Chahine G.L.** Shared-memory parallelization for two-way coupled Euler–Lagrange modeling of cavitating bubbly flows // J. Fluids Engineering. 2015. Vol. 137. No. 4. Pp. 121106-1 –121106-8.
20. **Kumzerova E.Yu., Schmidt A.A.** Numerical simulation of homogeneous nucleation and bubble dynamics in a depressurized liquid // Proc. 4th International Conference on Multiphase Flow. New Orleans, 2001.
21. **Strasberg M.** Undissolved air in cavitation nuclei // Cavitation in Hydrodynamics. London: National Phys. Lab., 1956.
22. **Hammitt F.G., Koller A., Ahmed O., Pjun J., Yilmaz E.** Cavitation threshold and superheat in various fluids // Proc. of Conference on Cavitation. Edinburg, September 3-5, 1974. Pp. 341–354.
23. **Бесов А.С., Кедринский В.К., Пальчиков Е.И.** Изучение начальной стадии кавитации с помощью дифракционной оптической методики // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. Вып. 4. С. 240–244.

Статья поступила в редакцию 29.09.2017, принята к публикации 09.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ИСАЕНКО Илья Игоревич — аспирант кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a906nn@gmail.com

МАХНОВ Андрей Васильевич — аспирант кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a_makhnov@mail.ru

СМИРНОВ Евгений Михайлович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnov_em@spbstu.ru

ШМИДТ Александр Александрович — кандидат физико-математических наук, заведующий сектором численного моделирования Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, доцент кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru

REFERENCES

- [1] **I.S. Pearsall**, Cavitation. UK: Mills and Boon, 1972.
- [2] **V.K. Kedrinskiy**, *Gidrodinamika vzryva. Eksperiment i modeli* [Explosion hydrodynamics. Experiment and models], Novosibirsk, the RAS Siberian Branch, 2000.
- [3] **Ya.E. Geguzin**, *Puzyri* [Bubbles], Moscow, Nauka, 1985.
- [4] **A.D. Pernik**, *Problemy kavitatsii* [Cavitation problems], Leningrad, Sudostroyeniye, 1966.
- [5] **R.T. Knapp, J.W. Daily, F.G. Hammitt**, Cavitation, McGraw-Hill, 1970.
- [6] **J.-P. Franc, J.-M. Michel**, *Fundamentals of cavitation*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [7] **R. Skoda, U. Iben, A. Morozov, et al.**, Numerical simulation of collapse induced shock dynamics for the prediction of the geometry, pressure and temperature impact on the cavitation erosion in microchannels, WIMRC 3rd International Cavitation Forum, 2011, University of Warwick, UK.
- [8] **N.V. Petrov, A.A. Schmidt**, Effect of a bubble nucleation model on cavitating flow structure in rarefaction wave, *Shock Waves*. 27 (4) (2017) 635–639.
- [9] **N.V. Petrov, A.A. Schmidt**, Multiphase phenomena in underwater explosion, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 60 (2015) 367–373.
- [10] **A. Sokolichin, G. Eigenberger, A. Lapin, A. Lübert**, Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows: Euler/Euler versus Euler/Lagrange, *Chemical Eng. Science*. 52 (4) (1997) 611–626.
- [11] **Lord Rayleigh**, VIII. On the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity, *Philosophical Magazine*, Ser. 6. 34 (200) (1917) 94–98.
- [12] **M. Plesset, A. Prosperetti**, Bubble dynamics and cavitation, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 9 (1977) 145–185.
- [13] **S. Frikha, O. Coutier-Delgosha, J.A. Astolfi**, Influence of the cavitation model on the simulation of cloud cavitation on 2D foil section, *Int. Journal of Rotating Machinery*. 2008 (2008), ID 146234, 12 p.
- [14] **A.A. Gavrilo, A.A. Dekterev, K.A. Finnikov**, *Modelirovaniye kavitatsionnykh techeniy s ispolzovaniyem RANS podkhoda* [Cavity flows simulation using RANS approach], *Proceedings of the 4-th Russian National Conf. on Heat Exchange (RNCHE-4)*, Moscow, 5 (2006) 241–244.
- [15] **Y. Shen, P. Dimotakis**, The influence of surface cavitation on hydrodynamic forces, *Proceedings of the 22nd American Towing Tank*



Conference, St. John's, Canada, August (1989) 44–53.

[16] **F. Bakir, R. Rey, A.G. Gerber, et al.**, Numerical and experimental investigations of the cavitating behavior of an inducer, *International Journal of Rotating Machinery*. 10 (1) (2004) 15–25.

[17] **U. Iben**, Modeling of cavitation; *Systems Analysis, Modeling and Simulation (SAMS)*. 42 (2002) 1283–1307.

[18] **D.P. Schmidt, C.J. Rutland, M.L. Corradini**, A fully compressible, two-dimensional model of small, high-speed, cavitating nozzles, *Atomization and Sprays*. 9 (3) (1999) 255–276.

[19] **J. Ma, C.-T. Hsiao, G.L. Chahine**, Shared-memory parallelization for two-way coupled Euler–Lagrange modeling of cavitating bubbly flows, *J. Fluids Engineering*. 137 (4) (2015) 121106-1–121106-8.

[20] **E.Yu. Kumzerova, A.A. Schmidt**, Numerical simulation of homogeneous nucleation and bubble dynamics in a depressurized liquid, *Proc. 4th International Conference on Multiphase Flow*. New Orleans (2001).

[21] **M. Strasberg**, Undissolved air in cavitation nuclei, *Cavitation in Hydrodynamics*. London: National Phys. Lab., 1956.

[22] **F.G. Hammitt, A. Koller, O. Ahmed, et al.**, Cavitation threshold and superheat in various fluids, *Proc. of Conference on Cavitation*. Edinburg, September 3-5 (1974) 341–354.

[23] **A.S. Besov, V.K. Kedrinskii, E.I. Pal'chikov**, Izucheniye nachalnoy stadii kavitatsii s pomoshchyu difraktsionnoy opticheskoy metodiki [Studying of initial stage of cavitation using diffraction-optic method], *Tech. Phys. Letters*. 10 (4) 1984. 240–244.

Received 29.09.2017, accepted 09.11.2017.

THE AUTHORS

ISAENKO Iliya I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
a906nn@gmail.com

MAKHNOV Andrey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
a_makhnov@mail.ru

SMIRNOV Evgeniy M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
smirnov_em@spbstu.ru

SCHMIDT Alexander A.

Ioffe Institute of RAS, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru

DOI: 10.18721/JPM.111107

УДК 621.373.826

КОНЦЕПЦИЯ ПОСТРОЕНИЯ СЕТИ БЕСПРОВОДНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СВЯЗИ МЕЖДУ НАДВОДНЫМИ КОРАБЛЯМИ

Е.Г. Чуляева¹, С.Н. Кузнецов², Б.И. Огнев²

¹ «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация;

²АО «Мостком», г. Рязань, Российская Федерация

Рассмотрена проблема организации беспроводной оптической многоузловой сети (MANET) связи между надводными кораблями. MANET-связь может служить альтернативой классическому радиосообщению. Создана компьютерная модель такой сети связи, выбран алгоритм дискретной математики для организации логической сетевой инфраструктуры (алгоритм Крускала) и выдвинуты основные технические требования к терминалам оптической связи. Для моделирования сети мобильных надводных кораблей разработано программное обеспечение «Эмулятор беспроводной оптической сети».

Ключевые слова: беспроводная оптическая связь; FSO; маршрутизация; терминал оптической связи; MANET

Ссылка при цитировании: Чуляева Е.Г., Кузнецов С.Н., Огнев Б.И. Концепция построения сети беспроводной оптической связи между надводными кораблями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 66 – 72. DOI: 10.18721/JPM.111107

THE CONCEPT OF BUILDING A WIRELESS OPTICAL COMMUNICATION NETWORK BETWEEN SURFACE SHIPS

E.G. Chulyaeva¹, S.N. Kuznetsov², B.I. Ognev²

¹Joint-stock company «Plasma», Ryazan, Russian Federation

²JSC «Mostcom», Ryazan, Russian Federation

The problem of organization of a wireless optical multi-node network (MANET) between surface ships has been considered. This type of connection can be an alternative to the classical radio message. The advantages of optical communication are faster data transmission, high security and immunity to interference. The goal of the work is creation of computer model of such communication network, a choice of an algorithm of the organization of logical network infrastructure and determination of the main technical requirements to optical communication terminals. The software “The emulator of a wireless optical network” was developed for simulation of the network of the moving surface ships. For the organization of a communication network the well-known algorithms of discrete mathematics (such as the Kruskal algorithm) were used. The simulation of the network was carried out; technical requirements to optical communication terminals as an element of the specified network were formulated.

Key words: wireless optical communication; free space optics; optical communication terminal; MANET

Citation: E.G. Chulyaeva, S.N. Kuznetsov, B.I. Ognev, The concept of building a wireless optical communication network between surface ships, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 66 – 72. DOI: 10.18721/JPM.111107

Введение

Для настоящего времени характерны растущие потребности в увеличении пропускной способности каналов связи, в том числе оптических линий [1 – 8]; задача повышения скорости передачи данных по линиям связи актуальна и при проектировании систем связи между морскими надводными кораблями (SS – Surface Ships).

Высокоскоростная связь нужна не только между SS, но и в сценариях связи SS – берег и SS – летательный аппарат для решения самых разнообразных проблем: от воздушной разведки до работы систем связи в режиме радиомолчания или повышенного уровня помех (например, средства радиоэлектронной борьбы). Качество радиосвязи, традиционной в данном сегменте, не отвечает современным требованиям, налагаемым на скорость передачи информации.

С другой стороны, применение высокоскоростной радиорелейной связи над водной поверхностью осложняется как условиями распространения радиосигналов над проводящей поверхностью, так и большими угловыми отклонениями SS (качка и маневрирование) относительно угловых размеров диаграмм направленности.

В силу указанных причин, практически единственным решением проблемы высокоскоростной связи между SS может служить беспроводная оптическая связь. Однако, ввиду ряда свойств данного вида связи и особенностей указанного применения, она в настоящее время практически не используется.

В данной работе рассмотрена концепция построения сети беспроводной оптической связи между SS, начиная от требований к терминалам оптической связи и заканчивая алгоритмами организации логической сетевой инфраструктуры.

Постановка задачи

Основным требованием при организации беспроводной оптической связи является наличие прямой видимости между приемопередатчиками (терминалами оптической связи (ОСТ)). Из-за кривизны поверхности Земли дальность прямой види-

мости существенно ограничивается. Так, при установке ОСТ на высоте 20 м, дистанция прямой видимости составляет не более 16 км.

Существенными факторами, осложняющими организацию беспроводного оптического канала связи между SS, являются относительно малые углы расходимости излучения передатчиков и малые углы зрения приемников ОСТ. Что касается передатчиков, то требование узких угловых диаграмм обусловлено необходимостью увеличения запаса по усилению (бюджета) линии связи. Снижение углов зрения приемников необходимо для минимизации их засветки посторонним излучением. Узкие угловые диаграммы приемопередатчиков ОСТ обладают теми преимуществами, что рядом установленные ОСТ практически не влияют друг на друга и детектирование сигнала невозможно вне створа луча (скрытность каналов связи). К недостатку применения узких диаграмм следует отнести необходимость создания специальных устройств для поиска, захвата и сопровождения абонента (прибор с зарядовой связью (ПЗС)) в процессе установления и поддержания оптического канала связи.

Одновременные требования как широких углов захвата системы связи, так и узких рабочих углов ОСТ приводят к необходимости использования оптического маяка или системы панорамного освещения, позволяющих каждому ОСТ найти всех возможных абонентов в видимом горизонте.

Кроме того, если для стационарных применений наведение ОСТ друг на друга возможно в ручном режиме (с их фиксацией на достаточно стабильной опоре), то для надводных кораблей при их маневрировании, а также в условиях качки, система ПЗС абсолютно необходима.

Еще одной серьезной проблемой, которую необходимо решать при организации сети беспроводной оптической связи, является разработка способов развертывания этой связи. В данном случае это может быть сеть нескольких мобильных объектов с возможностью организации на каждом из них нескольких связей точка-точка с другими объектами. В силу мобильности

связываемых объектов и нескольких направлений связи на каждом объекте, это должна быть мобильная динамическая (или самоорганизующаяся сеть), называемая в зарубежной литературе MANET (Mobile Ad hoc NETwork) [9].

Способы решения проблемы

Исходя из сформулированных выше требований к оборудованию, в качестве ОСТ должны применяться устройства беспроводной оптической связи, которые бы обеспечивали автоматический поиск и захват (идентификация и установление связи) абонента в широком угловом секторе по горизонту (отработка маневрирования SS) и, как минимум, $\pm 30^\circ$ по углу места (качка SS). Кроме того, необходимо сопровождение абонента в указанных условиях.

С точки зрения организации связи, система управления ОСТ каждого SS должна в каждый момент времени определять оптимальную конфигурацию направлений связи и режим использования портов, подключенных к каждому ОСТ. Для выполнения указанных задач система управления ОСТ должна иметь информацию о местоположении и ориентации главной оси SS в пространстве. Определение оптимальной сетевой конфигурации в MANET является достаточно сложной задачей [9, 10], решение которой существенно зависит от сценариев применения. Так, в работе [9] рассматривается общий случай конфигурирования сети с ее использованием на различных типах наземного рельефа, применением воздушных мобильных объектов и различных типов связи (RF-модули служат для передачи данных в диапазоне УКВ, например, Bluetooth и модули Wi-Fi).

В рассматриваемом случае организации беспроводной оптической связи между морскими SS задача значительно упрощается благодаря тому, что известны размеры области связности (до 20 км) и безусловно существует прямая видимость между SS.

В качестве базового варианта, для решения задачи построения сети необходимы следующие процедуры:

определение всех возможных линий связи между SS (на основе информации об

их размещении и ориентации);

построение оптимального (покрывающего) дерева связей между SS;

назначение оставшихся доступных связей в качестве резервных или параллельных каналов связи.

Исходя из возможных сценариев, построение указанного дерева связей можно осуществить не только на основе полной информации о размещении и ориентации SS (которая не всегда доступна), но и с использованием двух других вариантов:

во-первых, на основе заранее назначенного центрального узла (например, SS-флагмана);

во-вторых, путем параллельного построения отдельных каналов связи между соседними SS с постепенным объединением их в общую сеть.

В качестве описанных выше методов построения покрывающего дерева можно использовать хорошо известные алгоритмы дискретной математики Крускала, Прима и Борувки [11 – 14].

Моделирование организации сети

Для моделирования сети мобильных SS было разработано программное обеспечение «Эмулятор беспроводной оптической сети» (ПО ЭБОС).

Указанное ПО позволяет размещать на плоскости несколько SS с заданным количеством ОСТ на каждом из них, при этом задаются положение и ориентация каждого SS.

Базовым элементом в модели является надводный корабль, на котором установлены терминалы оптической связи с рабочими углами, оси которых направлены в противоположные стороны. Под рабочими углами подразумеваются секторы обзора в горизонтальной плоскости, содержащие направления, по которым можно установить связь (включая все три фазы установления связи: поиск, захват, сопровождение). Геометрическая модель, поясняющая расположение SS с ОСТ и рабочих углов, схематически представлена на рис. 1.

Согласно предлагаемой модели, каждый SS как объект сети характеризуется количеством ОСТ и их рабочими углами.

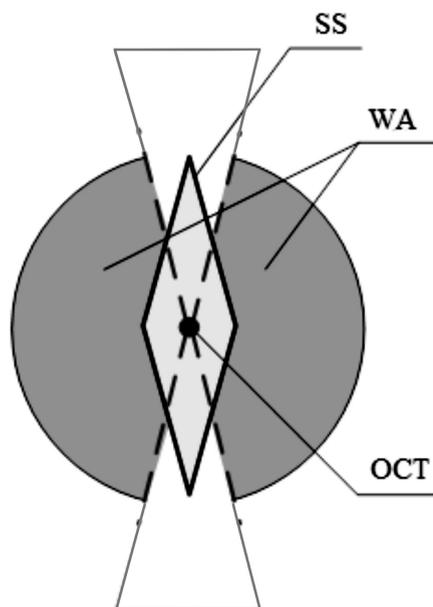


Рис. 1. Геометрическая модель, поясняющая расположение надводного корабля (SS) с терминалом оптической связи (OCT) и рабочих углов (WAs)

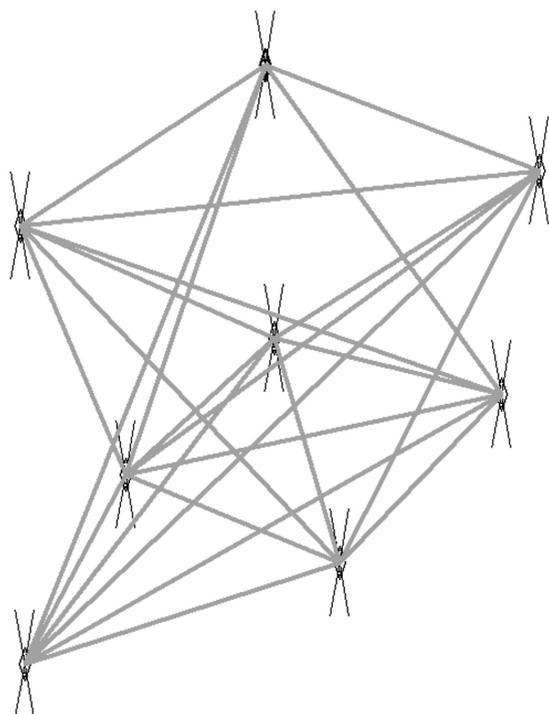


Рис. 2. Восемь надводных кораблей на плоскости моделирования программного обеспечения «Эмулятор беспроводной оптической сети» (ПО ЭБОС); показаны углы обзора OCT и все возможные линии связи

Использование данной модели предполагает, что при задании количества, расположения и ориентации надводных кораблей возможно построение графа возможных связей между SS.

На рис. 2 приведены восемь SS, расположенных в поле моделирования, с обозначенными углами обзора OCT и всеми возможными линиями связи.

Видно, что набор возможных связей между SS довольно объемный. Построение остоного дерева по алгоритму Крускала (исходя из знания полной картины расположения и ориентации SS) осуществлялось согласно блок-схеме, приведенной на рис. 3. Алгоритм был модифицирован в части поиска «безопасного ребра» (“a fail-safe edge”). При анализе каждой линии связи, т.е. кандидата на подключение к сети, учитывалось не только наличие принадлежности только одного узла к компоненте связности сети («безопасность»), но и наличие свободных OCT (an edge equipped with free OCT).

Применение указанного алгоритма позволило построить сеть связи (рис. 4).

Реализация алгоритмов Прима и Борувки для двух других сценариев построения сети связи дает то же самое остоное дерево (см. рис. 4). В остоном дереве могут остаться недействующие связи, реализация которых все же возможна (важно их количество). Оставшиеся возможные направления связи могут быть распределены с двумя целями:

- для резервирования уже установленных линий связи (параллельные соединения) с объединением их в один канал связи с балансированием нагрузки;

- для организации обходных путей (недействующие петли) с целью повышения надежности работы сети в целом.

Таким образом, моделирование сети связи показало возможность создания беспроводной оптической сети связи между произвольно расположенными надводными кораблями. При этом учитывается их расположение и использование терминалов оптической связи, обладающих конечными рабочими углами.

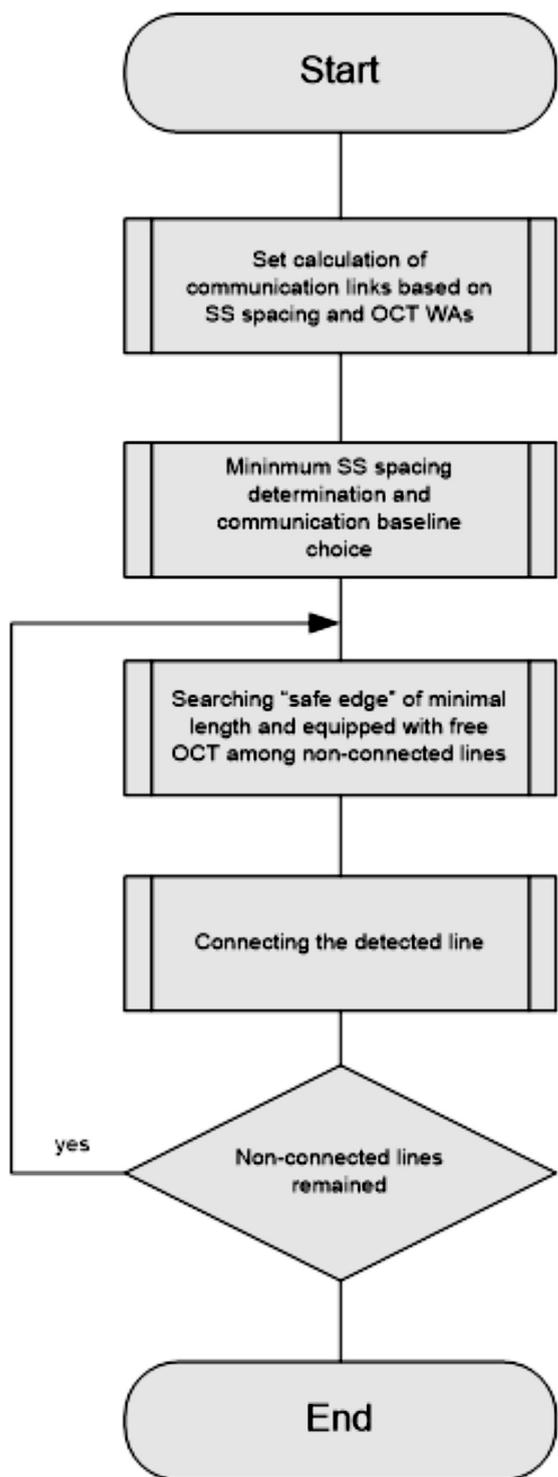


Рис. 3. Алгоритм Крускала для построения остоного дерева связи SS на плоскости моделирования ПО ЭБОС; алгоритм модифицирован в части поиска «безопасного ребра» (“safe edge”)

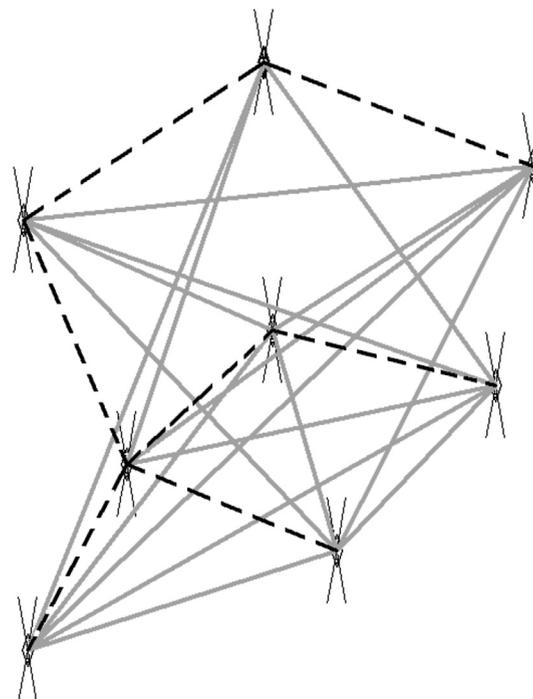


Рис. 4. Остоное дерево связи SS, полученное по алгоритму Крускала (см. рис. 3); основные линии связи показаны пунктирными линиями

На основе рассмотренных свойств OCT и способов организации связи необходимо сформулировать основные технические требования к реализации предлагаемой сети:

- в режиме поиска должна обеспечиваться панорамная подсветка SS для нахождения его абонентами (это OCT, установленные на других SS);

- следует разработать автонаведение OCT в режиме сопровождения (после установления связи), это автонаведение должно обеспечивать компенсацию всех видов качки SS;

- требуется наличие блока центрального управления всеми OCT, установленными на одном SS, с целью конфигурирования сети, маршрутизации, резервирования линий связи и балансировки потоков данных, а также обмена служебной информацией о состоянии сети с блоком центрального управления других SS и интеграцией с локальной сетью SS.

Заключение

Рассмотрены вопросы организации беспроводной оптической многоузловой сети связи между надводными кораблями. Определены алгоритмы организации сети связи для

использования в трех возможных сценариях; указанные алгоритмы дают одну конфигурацию остовного дерева связи. Сформулированы требования к техническим средствам обеспечения указанной сети связи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li Yu., Pappas N., Angelakis V., Pioro M., Di Yu. Optimization of free space optical wireless network for cellular backhauling // IEEE Journal on Selected Areas in Communications. 2015. Vol. 33. No. 2. Pp. 1841–1854.
2. Rong X., Won-Hyuk Y., Young-Chon K. Reconfigurable routing protocol for free space optical sensor networks // Sensors. 2012. Vol. 12. No. 4. Pp. 4824–4845.
3. Khalighi M., Uysal M. Survey on free space optical communication: A communication theory perspective // IEEE Communications Surveys Tutorials. 2014. Vol. 10. No. 2. Pp. 1–29.
4. Zhou H., Babaei A., Mao S., Agrawal P. Algebraic connectivity of degree constrained spanning trees for FSO networks // IEEE International Conference on Communications. 2013. 9–13 June. Budapest, Hungary. Pp. 5991–5996.
5. Forin D.M., Incerti G., Beleffi G.M.T., Teixeira A.L.J., Costa L.N., De Brito A.P.S., Geiger B., Leitgeb E., Nadeem F. Free space optical technologies (Ch. 13) // Trends in Telecommunications Technologies. Ed. by Ch.J. Bouras. Publisher: Intech, 2010. Pp. 257–296.
6. Alkholidi A.G., Altowij K.S. Free space optical communications: theory and practices // Contemporary Issues in Wireless Communications. Ed. M. Khatib. Ch. 5. InTech, 2014. Pp. 159–212.
7. Гуров В.С., Зоркин В.С., Гомозкова Е.Ю., Кондрахин А.А., Мельничук Г.В., Паюров А.Я., Огнев Б.И., Чуляева Е.Г. Информационные лазерные технологии в промышленности и системах связи. Рязань: Рязан. гос. радиотехн. ун-т, 2016. 92 с.
8. Гуров В.С., Мишин В.Ю., Чуляева Е.Г. Лазерные информационные технологии. Lambert Academic Publishing, 2017. 114 с.
9. Dwivedi A., Harshavardhana P., Velez P.G., Tebben D.J. Dynamic topology optimization for assuring connectivity in multihop mobile optical wireless communications networks // J. Hopkins Apl. Techn. Digest. 2011. Vol. 30. No. 2. Pp. 151–167.
10. Kaushal H., Kaddoum G. Free space optical communication: challenges and mitigation techniques // IEEE Communications Surveys & Tutorials. 2017. Vol. 19. No. 1. Pp. 57–96.
11. Белоусов А.И., Ткачев С.Б. Дискретная математика. М.: МГТУ, 2006. 744 с.
12. Cheriton D., Tarjan R.E. Finding minimum spanning trees // SIAM Journal on Computing. 1976. Vol. 5. No. 4. Pp. 724–741.
13. Eppstein D. Spanning trees and spanners. Handbook of computational geometry. 1999. Pp. 425–461.
14. Mareš M. Two linear time algorithms for MST on minor closed graph classes // Archivum mathematicum. 2004. Vol. 40. No. 3. Pp. 315–320.

Статья поступила в редакцию 24.10.2017, принята к публикации 06.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧУЛЯЕВА Елена Георгиевна — доктор технических наук, старший научный сотрудник АО «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация.
390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
grp@plasmalabs.ru

КУЗНЕЦОВ Сергей Николаевич — директор по информационным технологиям АО «Мостком», г. Рязань, Российская Федерация.
390046, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Фрунзе, 6.
ksn@mостком.ru

ОГНЕВ Борис Игоревич — директор по развитию АО «Мостком», г. Рязань, Российская Федерация.
390046 г. Рязань, ул. Фрунзе, 6.
develop@mостком.ru

REFERENCES

- [1] **Yu. Li, N. Pappas, V. Angelakis, M. Piore, Yu. Di**, Optimization of free space optical wireless network for cellular backhauling, *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*. 33 (2) (2015) 1841–1854.
- [2] **X. Rong, Y. Won-Hyuk, K. Young-Chon**, Reconfigurable routing protocol for free space optical sensor networks, *Sensors*. 12 (4) (2012) 4824–4845.
- [3] **M. Khalighi, M. Uysal**, Survey on free space optical communication: A communication theory perspective, *IEEE Communications Surveys & Tutorials*. 10 (2) (2014) 1–22.
- [4] **H. Zhou, A. Babaei, S. Mao, P. Agrawal**, Algebraic connectivity of degree constrained spanning trees for FSO networks, *IEEE ICC*, 9–13 June. Budapest, Hungary (2013) 5991–5996.
- [5] **D.M. Forin, G. Incerti, G.M.T. Beleffi, et al.**, Free space optical technologies, In: *Trends in Telecommunications Technologies*, Ch. 13, Ed. Ch.J. Bouras, Intech (2010) 257–296.
- [6] **A.G. Alkholidi, K.S. Altowij**, Free space optical communications: Theory and practices, In: *Contemporary Issues in Wireless Communications*, Ch. 5, Ed. M. Khatib, InTech (2014) 159–212.
- [7] **V.S. Gurov, V.S. Zorkin, E.Yu. Gomozkova, et al.**, *Informatsionnyye lazernyye tekhnologii v promyshlennosti i sistemakh svyazi* [Informational laser technologies in industry and communications systems], Ryazan, Ryazan. State Radioeng. Un-ty, 2016.
- [8] **V.S. Gurov, V.Yu. Mishin, E.G. Chulyayeva**, *Lazernyye informatsionnyye tekhnologii* [Informational laser technologies], Lambert Academmic Publishing, 2017.
- [9] **A. Dwivedi, P. Harshavardhana, P.G. Velez, D.J. Tebben**, Dynamic topology optimization for assuring connectivity in multihop mobile optical wireless communications networks, *Johns Hopkins Apl. Technical Digest*. 30 (2) (2011) 151–167.
- [10] **H. Kaushal, G. Kaddoum**, Free space optical communication: challenges and mitigation techniques, *IEEE Communications Surveys & Tutorials*. 19 (1) (2017) 57–96.
- [11] **A.I. Belousov, S.B. Tkachev**, *Diskretnaya matematika* [Discrete mathematics], Moscow, MSTU, 2006.
- [12] **D. Cheriton, R.E. Tarjan**, Finding minimum spanning trees, *SIAM Journal on Computing*. 5 (4) (1976) 724–741.
- [13] **D. Eppstein**, Spanning trees and spanners, *Handbook of Computational Geometry* (1999) 425–461.
- [14] **M. Mareš**, Two linear time algorithms for MST on minor closed graph classes, *Archivum mathematicum*. 40 (3) (2004) 315–320.

Received 24.10.2017, accepted 06.11.2017.

THE AUTHORS

CHULYAEVA Elena G.

Joint-stock company "Plasma"

24 Tsiolkovskogo St., Ryazan, 390000, Russian Federation.
grp@plasmalabs.ru

KUZNETSOV Sergey N.

JSC "Mostcom"

6 Frunze St., Ryazan, 390046, Russian Federation.
ksn@mocckom.ru

OGNEV Boris I.

JSC "Mostcom"

6 Frunze St., Ryazan, 390046, Russian Federation.
develop@mocckom.ru



DOI: 10.18721/JPM.111108

УДК 532.526

ФОРМИРОВАНИЕ ВИХРЕВОЙ СТРУКТУРЫ В ОКРЕСТНОСТИ СТЫКА КРУГОВОГО ЦИЛИНДРА С ВЕРТИКАЛЬНОЙ НАГРЕТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Ю.С. Чумаков, А.М. Левченя, Х. Малах

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Приводятся результаты численного расчета и анализ процесса взаимодействия свободно-конвективного пограничного слоя, который развивается на вертикальной нагретой поверхности, с трехмерным препятствием (круговой цилиндр), примыкающим к этой поверхности. Ось цилиндра направлена по нормали к поверхности. Численная модель базируется на уравнениях Навье – Стокса и баланса энергии. Исходная система трехмерных уравнений решается в приближении Буссинеска. Показано, что наличие препятствия на поверхности способствует образованию сложной вихревой структуры не только за цилиндром, но и перед ним. В частности, перед цилиндром, вверх по потоку, образуется подковообразный вихрь. Подобное вихреобразование наблюдается в вынужденно-конвективных течениях и в последнее время привлекает внимание многих исследователей. В настоящей работе представлены предварительные итоги исследования структуры сложного трехмерного вихревого течения в условиях свободной конвекции и влияния этого течения на теплообмен.

Ключевые слова: численное моделирование; свободно-конвективный теплообмен; вихревая структура; подковообразный вихрь; коэффициент теплообмена

Ссылка при цитировании: Чумаков Ю.С., Левченя А.М., Малах Х. Формирование вихревой структуры в окрестности стыка кругового цилиндра с вертикальной нагретой поверхностью // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 73 – 85. DOI: 10.18721/JPM.111108

THE VORTEX STRUCTURE FORMATION AROUND A CIRCULAR CYLINDER PLACED ON A VERTICAL HEATED PLATE

Yu.S. Chumakov, A.M. Levchenya, H. Malah

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

The interaction process analysis and results of numerical simulation of a free-convection boundary layer developing around a circular cylinder placed on a vertical heated plate are presented. The cylinder axis is directed normally to the plate. The numerical model is based on the Navier–Stokes and the energy balance equations. The assumed system of equations is solved using the Boussinesq approximation. It is shown that the presence of a three-dimensional obstacle (cylinder) on the plate results in the formation of a complex vortex structure both upstream and downstream of the cylinder. In particular, a horseshoe vortex formed upstream of it is similar to vortex formation that has been observed in forced convection heat transfer by many researchers. In this paper, the tentative results of the study of the complex three-dimensional vortical structure in conditions of free convection and its influence on the heat transfer are presented.

Key words: numerical modeling; natural convection heat transfer; vortex structure; horseshoe vortex system; heat transfer coefficient

Citation: Yu.S. Chumakov, A.M. Levchenya, H. Malah, The vortex structure formation around a circular cylinder placed on a vertical heated plate, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 73 – 85. DOI: 10.18721/JPM.11108

Введение

За последние 10 – 20 лет заметно возрос интерес к течениям, возникающим при взаимодействии пограничного слоя с различными препятствиями на поверхности, вдоль которой развиваются эти течения. Натекание потока на препятствие инициирует встречный градиент давления, приводящий к отрыву пограничного слоя. Для таких течений характерно образование довольно сложной вихревой структуры и, в первую очередь, образование так называемого подковообразного вихря (ПВ) [1].

К подобным течениям можно отнести вынужденно-конвективные, возникающие в области сочленения крыла с фюзеляжем самолета, торцевых областях турбинных решеток, в различных теплообменниках сложной геометрии. Область повышенного давления в подобных течениях растянута вдоль всей высоты препятствия, на которое набегаем внешний поток, поэтому отрыв пограничного слоя и возникающий ПВ весьма интенсивны. Обзор многочисленных экспериментальных исследований, проведенных до начала XXI века и посвященных исследованию форм ПВ в вынужденно-конвективных течениях, представлен в работе [2], а исследования последних пятнадцати лет упомянуты в недавно выполненной экспериментальной работе [3].

Очевидно, что развивающиеся вихревые структуры оказывают заметное влияние на различные обменные процессы в потоке, а при наличии перепада температур между потоком и обтекаемой поверхностью могут способствовать появлению значительных неоднородностей локальной теплоотдачи. В технике существует целый класс теплообменных аппаратов, в которых теплообмен осуществляется в условиях свободно-конвективного течения. Одна из моделей подобных теплообменников может быть представлена в виде, например, вертикальной нагретой поверхности, вдоль которой формируется свободно-конвективный пограничный слой. На ней могут быть уста-

новлены различные устройства, температура которых равна или отличается от температуры поверхности. В узкой области соударения свободно-конвективного пограничного слоя и препятствия возникает зона повышенного давления, что приводит к отрыву пограничного слоя. Таким образом, по аналогии с вынужденно-конвективным течением, можно предположить, что и в этом случае в окрестности передней части препятствия на поверхности может образовываться сложная вихревая структура, содержащая подковообразный вихрь. Особенности развития течения в этом случае будут определяться не только интенсивностью отрыва, но и действием сил плавучести на отесняемый от пластины нагретый поток.

На современном этапе развития вычислительной гидроаэродинамики большое внимание уделяется применению методик численного моделирования для расчета существенно трехмерных течений с подковообразными вихревыми структурами в вынужденно-конвективных пограничных слоях (см., например, работы [4, 5]). Успех расчета теплообмена в устройствах с натеканием свободно-конвективного пограничного слоя на препятствие будет в значительной мере зависеть от точности воспроизведения сложной динамической структуры вихревых образований как непосредственно в области сочленения выступающих объектов с поверхностью, так и в следе за ними. При этом надо иметь в виду, что само течение возникает за счет локально действующей массовой силы, а не предписывается набегающим потоком. К сожалению, в известной авторам литературе ни экспериментальных, ни расчетных работ, посвященных изучению подковообразных вихрей в свободно-конвективных течениях, не обнаружено. Имеется работа [6], посвященная анализу нестационарной свободной конвекции вблизи вертикальной поверхности при его локальном возмущении за счет размещения на стенке небольшого кубического препятствия. Авторы показа-

ли, что наличие цилиндра, погруженного в свободно-конвективный пограничный слой, интенсифицирует теплоотдачу.

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования трехмерного свободно-конвективного течения, которое возникает около вертикальной нагретой поверхности и примыкающего к ней кругового цилиндра; ось последнего направлена по нормали к поверхности.

Постановка задачи

В приближении Буссинеска рассматривается ламинарное течение вязкой несжимаемой жидкости в окрестности кругового цилиндра, установленного на прямоугольной вертикальной плоскости, далее называемой пластиной. Пластина нагрета относительно среды, заполняющей внешнее пространство. Под действием возникающей в гравитационном поле силы плавучести воздух вблизи пластины поднимается, формируя вдоль нее свободно-конвективный пограничный слой. Поверхности пластины и цилиндра в представляемых расчетах служат границами расчетной области; сопряженный теплообмен не моделируется. В процессе вариантных расчетов изменяются два параметра задачи: температура цилиндра и его высота.

Цели работы – проанализировать влияние уровня нагрева цилиндра на структуру трехмерного свободно-конвективного течения в окрестности стыка цилиндра и пластины, а также сравнить особенности течения и теплообмена, когда цилиндр полностью погружен в пограничный слой и когда высота цилиндра превышает толщину пограничного слоя.

На рис. 1 представлена схема расчетной области и система координат, также приведены граничные условия (описываются далее). Начало системы координат расположено на расстоянии 0,8 м от нижней кромки пластины и совпадает с центром основания цилиндра, ось X соответствует горизонтальному направлению, ось Y – вертикальному (в направлении потока), а ось Z перпендикулярна пластине.

Диаметр цилиндра $D = 0,02$ м. Расчетная область имеет форму параллелепипеда

высотой $120D$, шириной $25D$ и толщиной $10D$. Все расчеты выполнены с искусственной симметризацией течения в плоскости, параллельной линии действия силы тяжести, разделяющей цилиндр пополам вдоль его оси. Расстояние от оси цилиндра до нижней границы расчетной области равно $50D$, а до верхней – $70D$ (см. рис. 1). Высота цилиндра, «вырезанного» из расчетной области, варьируется в расчетах (конкретные значения указаны в табл. 1).

Граничные условия показаны на рис. 1 и формулируются следующим образом. Поверхности пластины и цилиндра – твердые стенки (серый фон) с условием прилипания. Температура пластины для всех вариантов равна $60\text{ }^\circ\text{C}$, температура поверхности цилиндра задается согласно табл. 1. На нижней и верхней границах области также ставится условие прилипания с температурой, равной температуре внешней среды $20\text{ }^\circ\text{C}$. На плоскости, разделяющей цилиндр пополам вдоль его оси, и параллельной ей внешней границе, заданы условия симметрии. На участках длиной $10D$ перед пластиной и после нее (по вертикальному направлению) также ставится условие симметрии, которое реализует непроницаемость и проскальзывание на этих участках. Плоскость, параллельная пластине, проницаема: поток может как втекать через нее, эжектируемый пограничным слоем (в этом случае температура затекающего воздуха равна $20\text{ }^\circ\text{C}$), так и выходить наружу, будучи вытеснен обтекаемым препятствием.

Для численного моделирования используются расчетные сетки, согласованные с границами расчетной области. Сетки имеют высокую степень детализации вблизи твердых поверхностей и во всей окрестности препятствия для повышения качества разрешения подковообразных вихревых структур. Сетка сгущена к твердым стенкам с коэффициентом сгущения 1,05. В плоскости пластины построены блочно-структурированные сетки из четырехугольников с прямоугольными ячейками вдали от препятствия. Блок сетки в окрестности цилиндра представляет собой C -сетку в форме «гайки», охватывающей цилиндр (рис. 2). Дополнительные блоки сетки

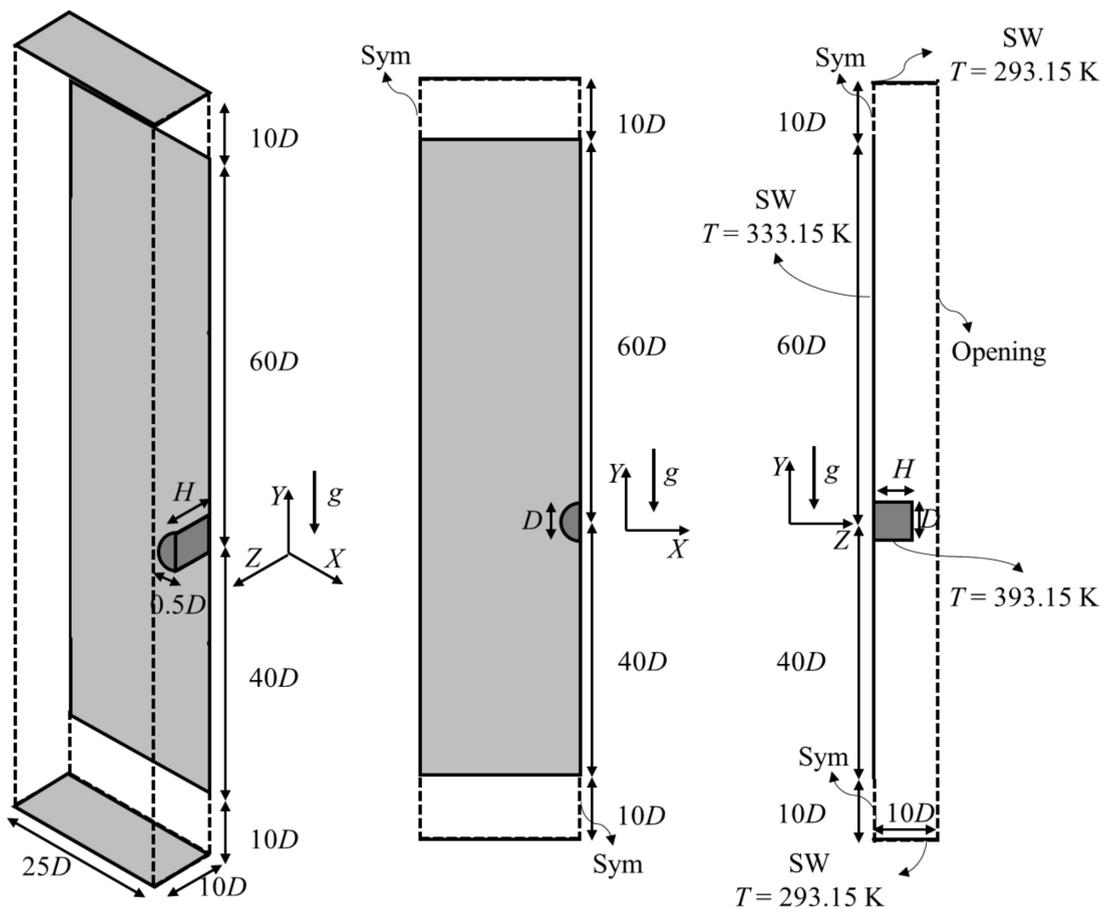


Рис. 1. Геометрия расчетной области при численном моделировании:
 H , D – высота и диаметр цилиндра, g – ускорение свободного падения, T – температура, Sym – симметрия, SW – твердые стенки (показаны серым фоном), Opening – проницаемая граница

между детальной сеткой в окрестности цилиндра и менее детализированной внешней областью служат для выравнивания формы и размера ячеек. Такая конфигурация подобластей выбрана для того, чтобы обеспечить эффективное измельчение сетки в

интересующей нас области без образования сильно скошенных или вытянутых ячеек, что могло бы произойти при использовании единой структуры сетки для всей расчетной области. Результирующая сетка в плоскости пластины состоит примерно из

Таблица 1

Рассматриваемые конфигурации и режимы обогрева

| Вариант расчета | Безразмерная высота цилиндра (H/D) | Температура поверхности цилиндра, °C |
|-----------------|--|--------------------------------------|
| В-1-60 | 1 | 60 |
| В-1-120 | 1 | 120 |
| В-5-60 | 5 | 60 |
| В-5-120 | 5 | 120 |

50 тыс. ячеек. В плоскости YZ сгущение сетки в окрестности цилиндра выполнялось таким образом, чтобы размер ячейки в области образования подковообразного вихря был в 50 раз меньше диаметра цилиндра D . В направлении нормали к пластине сетка состоит из 73 ячеек со сгущением к пластине и торцу цилиндра. Трехмерные сетки получены трансляцией исходной сетки по направлению нормали к пластине. Размер пристенной ячейки составлял $0,014D$, и 31 ячейка попадает внутрь невозмущенного цилиндром пограничного слоя. Размер ячеек во внутреннем блоке внутри области образования ПВ составляет $(0,014 - 0,040)D$. Размеры ячеек по всей расчетной области не превышают $0,3D$ по любому из направлений. Размерность результирующей трехмерной сетки – около 3,6 млн. ячеек.

В работе для проведения расчетов применялся коммерческий пакет ANSYS FLUENT 16.2 [7]. Решение уравнений Навье – Стокса и энергии разыскивалось с использованием совмещенного (coupled) алгоритма. Дискретизация определяющих уравнений производилась со вторым порядком точности для всех пространственных производных.

Трудности, возникающие при моделировании свободно-конвективных течений,

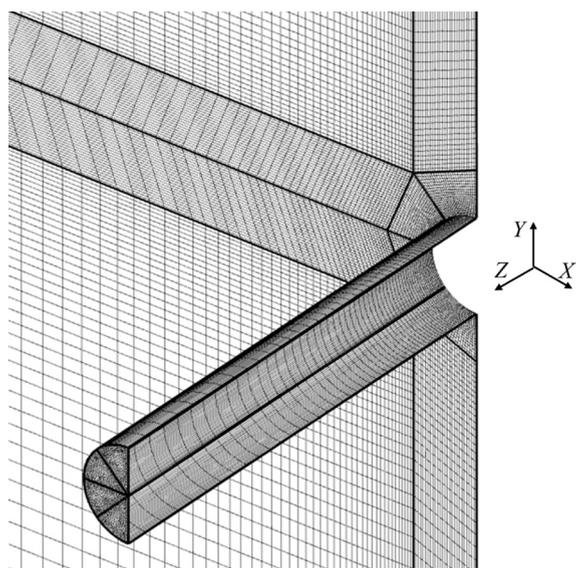


Рис. 2. Фрагмент расчетной сетки вблизи цилиндра

обусловлены прежде всего относительно небольшими скоростями движения и необходимостью совместного решения уравнений движения и энергии, поэтому численная модель менее стабильна, чем при расчете вынужденной конвекции. При расчетах малая инерция потока и тесная связь уравнений движения и энергии приводят к необходимости выполнять большее количество итераций для получения сошедшегося решения. В представленных расчетах число итераций составляло от 1350 до 1600, а балансы сводились с точностью до 10^{-6} .

Результаты и их анализ

В результате расчетов получены стационарные решения для четырех вариантов, перечисленных в табл. 1. Особый интерес представляют результаты в окрестности закрепленного на пластине цилиндра. Наличие этого цилиндра полностью разрушает набегающий поток и превращает двумерный свободно-конвективный пограничный слой в трехмерное течение, что, в конечном итоге, оказывает существенное влияние на теплообмен.

В случае вынужденной конвекции структура течения в целом предписана параметрами набегающего потока, а теплообмен в рамках модели несжимаемой жидкости не оказывает влияния на поле течения. В то же время в условиях свободной конвекции течение возникает под действием силы плавучести, интенсивность которой зависит от локального перепада температуры. Для оценки степени воздействия цилиндра на разрушение набегающего двумерного свободно-конвективного пограничного слоя и образования в результате обширной области трехмерного вихревого течения, анализ результатов целесообразно начать с определения границ температурной неоднородности в окрестности цилиндра. С этой целью для каждого варианта расчета в различных продольных сечениях YZ ($X = \text{const}$, выбирается) определена 2%-я толщина области с температурными неоднородностями, которую в дальнейшем будем называть пристенной областью. Под этой толщиной, далее обозначаемой δ , подразумевается координата на плоскости

Таблица 2

Результаты оценки ширины области возмущения

| Вариант расчета | Ширина области возмущения (X/D) |
|-----------------|-------------------------------------|
| В-1-60 | 2,25 |
| В-1-120 | 2,25 |
| В-5-60 | 2,50 |
| В-5-120 | 2,40 |

YZ , в которой локальная температура отличается от температуры на внешней границе расчетной области на 2 %.

Путем сравнения полученных результатов с соответствующей толщиной невозмущенного пограничного слоя, была определена протяженность области влияния цилиндра на двумерный пограничный слой. В частности, в табл. 2 приведены размеры области влияния цилиндра на уровне горизонтальной линии $Y = 0$, вдоль оси X от поверхности цилиндра.

Из табл. 2 следует, что увеличение температуры поверхности короткого цилиндра не влияет на ширину области возмущения поля температуры (варианты В-1-60 и В-1-120), но приводит к уменьшению этой области в случае длинного цилиндра (В-5-60, В-5-120). Можно также заметить, что увеличение высоты цилиндра приводит к расширению области возмущения независимо от нагрева цилиндра.

На рис. 3 сопоставлены 2%-е толщины невозмущенного двумерного пограничного слоя с их величиной при наличии возмущения (цилиндра) вдоль пластины на линии симметрии ($X = 0$). Отметим, что максимальная расчетная толщина температурного пограничного слоя, который развивается на вертикальной нагретой пластине без препятствия, составляет примерно 0,022 – 0,025 м.

При анализе графиков, представленных на рис. 3, можно отметить следующее:

эффект препятствия распространяется довольно далеко вверх по потоку, уже на

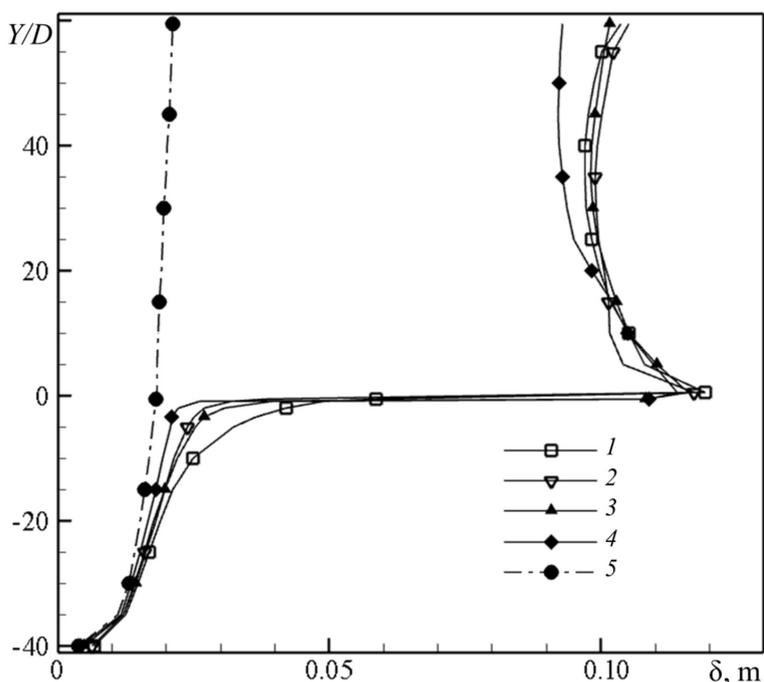


Рис. 3. Расчетные зависимости 2%-й толщины пристенной области δ от координаты Y/D , полученные для разных вариантов: В-1-60 (1), В-1-120 (2), В-5-60 (3), В-5-120 (4) (см. табл. 1); представлена также зависимость для случая отсутствия цилиндра (5)

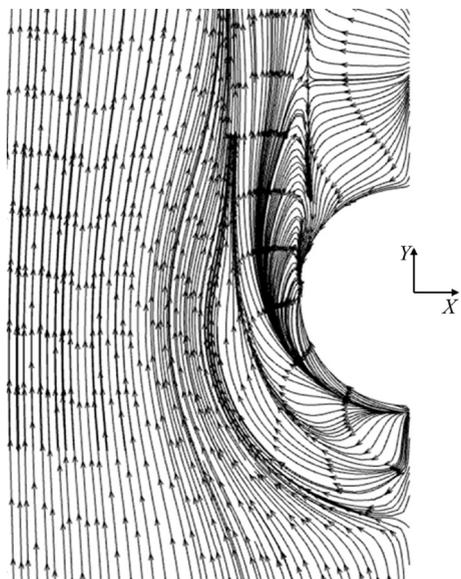


Рис. 4. Донные линии тока на пластине для варианта В-1-60 (см. табл. 1)

расстоянии $Y/D = -35$ заметно влияние цилиндра на толщину пристенного слоя, причем это влияние больше в случае короткого цилиндра;

увеличение температуры цилиндра слегка уменьшает степень влияния на течение вверх по потоку;

в области за цилиндром значения толщины пристенного слоя практически одинаковы для всех вариантов, за исключением варианта В-5-120, для которого наблюдается некоторое уменьшение толщины. Причина подобного поведения, возможно, связана с тем, что длинный нагретый цилиндр, выступая за пределы пристенного слоя, инициирует собственный свободноконвективный поток, тем самым оказывая влияние на течение вблизи поверхности.

Проанализируем подробнее поле течения в области стыковки цилиндра и поверхности. Донные линии тока на по-

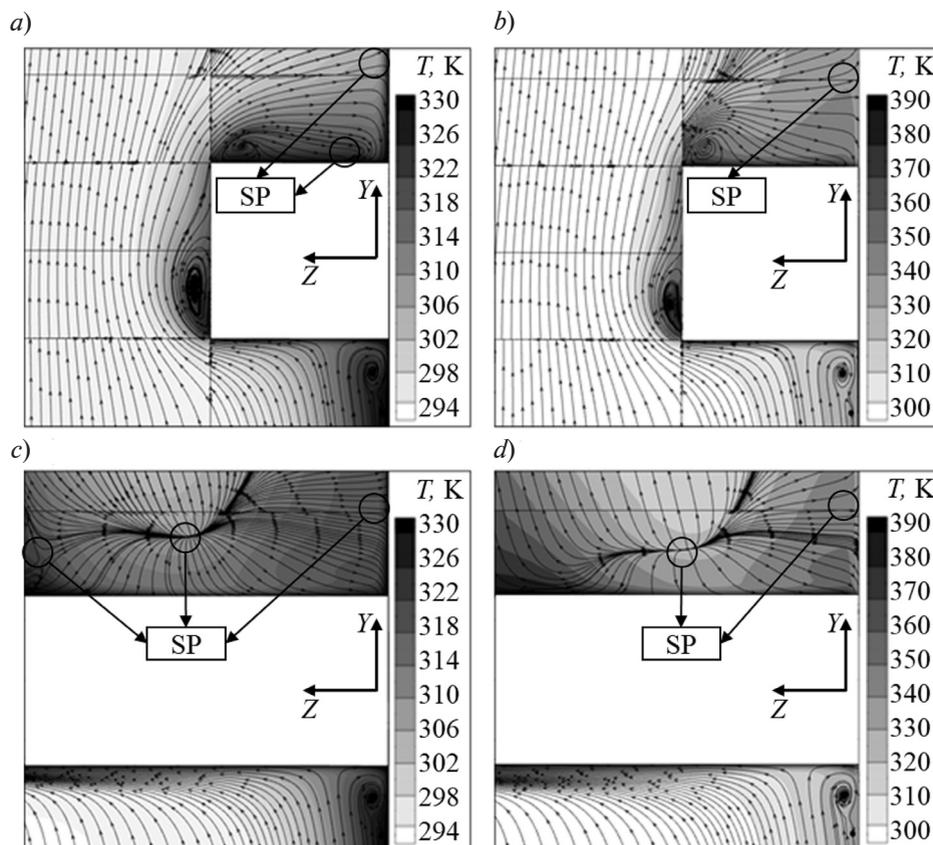


Рис. 5. Линии тока и температурные поля (в виде градаций серого) в плоскости симметрии YZ для вариантов расчета В-1-60 (а), В-1-120 (б), В-5-60 (с), В-5-120 (д) (см. табл. 1); SP – особые точки

верхности пластины вблизи цилиндра для варианта В-1-60 показаны на рис. 4. Подобная картина, являясь «отпечатком» образовавшихся вихревых структур, позволяет идентифицировать линию разделения (отрыва пограничного слоя) выше по потоку от цилиндра, внутри которой расположены подковообразные вихри, опоясывающие препятствие. Вблизи цилиндра видны отпечатки зарождающегося перед ним углового вихря и развитие всей структуры в следе за препятствием.

Фрагменты картин линий тока на фоне температурных полей (в виде градаций серого) показаны на рис. 5 в плоскости симметрии YZ ($X = 0$). Сравнение разных режимов позволяет проанализировать влияние высоты цилиндра и его перегрева относительно среды на размеры ПВ. На каждом рисунке в угловой области сочленения цилиндра и пластины различимы вихри: основной (более интенсивный) и вторичный (слабый) ПВ; вторичный расположен выше по потоку от основного, образовавшегося в результате отрыва подходящего вдоль пластины свободно-конвективного пограничного слоя. Размеры ПВ близки для всех вариантов расчета. Для случаев обтекания короткого цилиндра (рис. 5, *a, b*) виден вихрь, образующийся на торце цилиндра. Его ось сдвигается вверх по потоку (к цилиндру) при увеличении температуры его поверхности. В следе за препятствием образуется сложная вихревая структура: для короткого цилиндра это концентрированный вихрь (рециркуляционный пузырь). Закрученные течения внутри вихрей перемешивают и рассеивают прогретый воздух, изменяя теплоотдачу на поверхности пластины и закрепленного на ней цилиндра.

В области после цилиндра для всех четырех рассмотренных случаев имеется несколько особых точек (SP – singular points, см. рис. 5), наличие которых позволяет провести аналогию с торнадо [8]. Указанные сингулярности «затягивают» частицы жидкости вверх, вдоль пластины; они сдвигаются вниз при увеличении температуры поверхности цилиндра и его высоты. На рис. 6 показаны вихри в виде торнадо для варианта В-5-120. При увеличении высоты

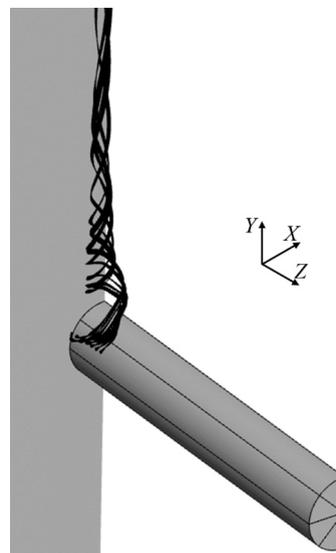


Рис. 6. Линии тока в кормовой части цилиндра (вариант В-5-120)

цилиндра и уменьшении температуры его поверхности основание воронки вихря отодвигается от плоскости симметрии цилиндра вдоль оси x .

Основной и вторичный подковообразные вихри сливаются друг с другом и образуют единую структуру, которая медленно движется по направлению к цилиндру, и, в конце концов, способствует образованию системы ПВ [9] (рис. 7).

На рис. 7 для визуализации трехмерных вихревых структур используется Q -критерий [10], который определяют следующим образом:

$$Q = \frac{1}{2}(\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}), \quad (2)$$

где Ω_{ij} , S_{ij} – антисимметричная и симметричная части второго инварианта тензора градиента скорости, соответственно.

Согласно работе [10], вихревые структуры могут определяться в областях, где $Q > 0$, когда локальная скорость вращения превышает скорость деформации. Если сравнивать распределения Q -критерия вблизи поверхности цилиндра и в области сочленения цилиндра с пластиной для каждого варианта расчетов (рис. 7), то можно получить информацию о топологии и уровне интенсивности вихревых структур.

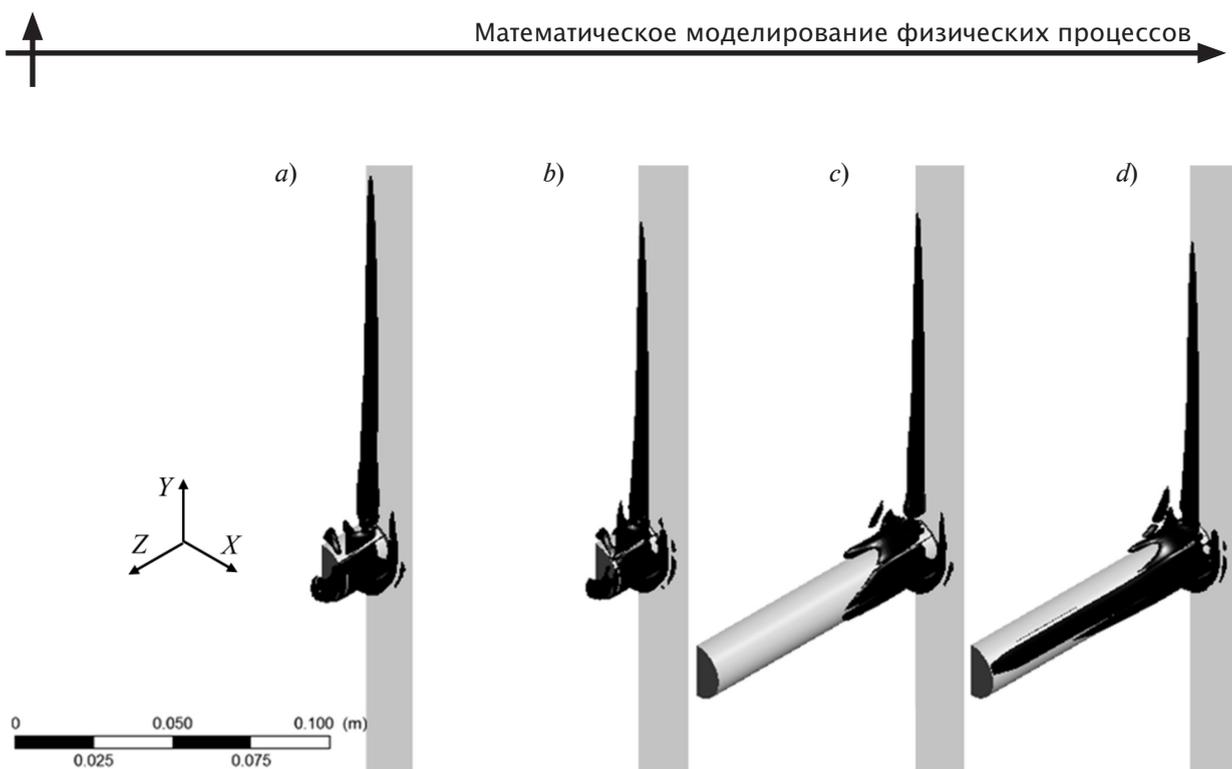


Рис. 7. Визуализация вихревой структуры потока вокруг цилиндра с использованием изоповерхностей Q -критерия для вариантов В-1-60 (а), В-1-120 (б), В-5-60 (с), В-5-120 (д)

Заметим, что системы ПВ, которые сформировались в расчетах при совпадающей высоте цилиндра, одинаковы по форме, но имеют разный размер ветви основного ПВ и различную интенсивность, а для четвертого варианта наблюдается увеличение Q -критерия по всей высоте цилиндра. Независимо от высоты цилиндра, при увеличении его температуры изоповерхность Q -критерия вытягивается вдоль всей высоты цилиндра, охватывая полностью его боковую поверхность, что соответствует интенсификации вихревых структур. Ветви основного ПВ за цилиндром уменьшаются с увеличением температуры поверхности цилиндра и его высоты.

Краткий анализ течения в окрестности стыка цилиндра с пластиной и в следе за цилиндром свидетельствует о формировании весьма сложной вихревой структуры, благодаря которой осуществляется интенсивное перемешивание холодного и горячего воздуха, что, безусловно, оказывает существенное влияние на теплообмен в этой области. Для анализа влияния на теплоотдачу трехмерного вихревого течения удобно воспользоваться коэффициентом теплопередачи α , который определяют сле-

дующим образом:

$$\alpha = q / \Delta T,$$

где q – тепловой поток от стенки, ΔT – перепад температур между стенкой и внешней средой.

Распределения коэффициента теплопередачи вдоль ломаной линии пересечения плоскости симметрии и твердых стенок показаны для всех вариантов расчетов на рис. 8. Последний состоит из трех отдельных пространственно связанных графиков, на каждом из которых приведены одно или два семейства кривых.

На нижнем графике показаны два семейства кривых. Первое из них – распределение величины $\alpha (Y/D)$ вдоль участка пластины под цилиндром (выше по потоку от него); координатной служит вертикальная ось графика, а значения α отложены по горизонтали. Для разных вариантов расчета эти распределения совпадают друг с другом, величина α монотонно снижается по мере развития пограничного слоя на пластине, вплоть до области непосредственно перед цилиндром ($Y/D > -1$), где образуется подковообразный вихрь, при этом монотонность нарушается.

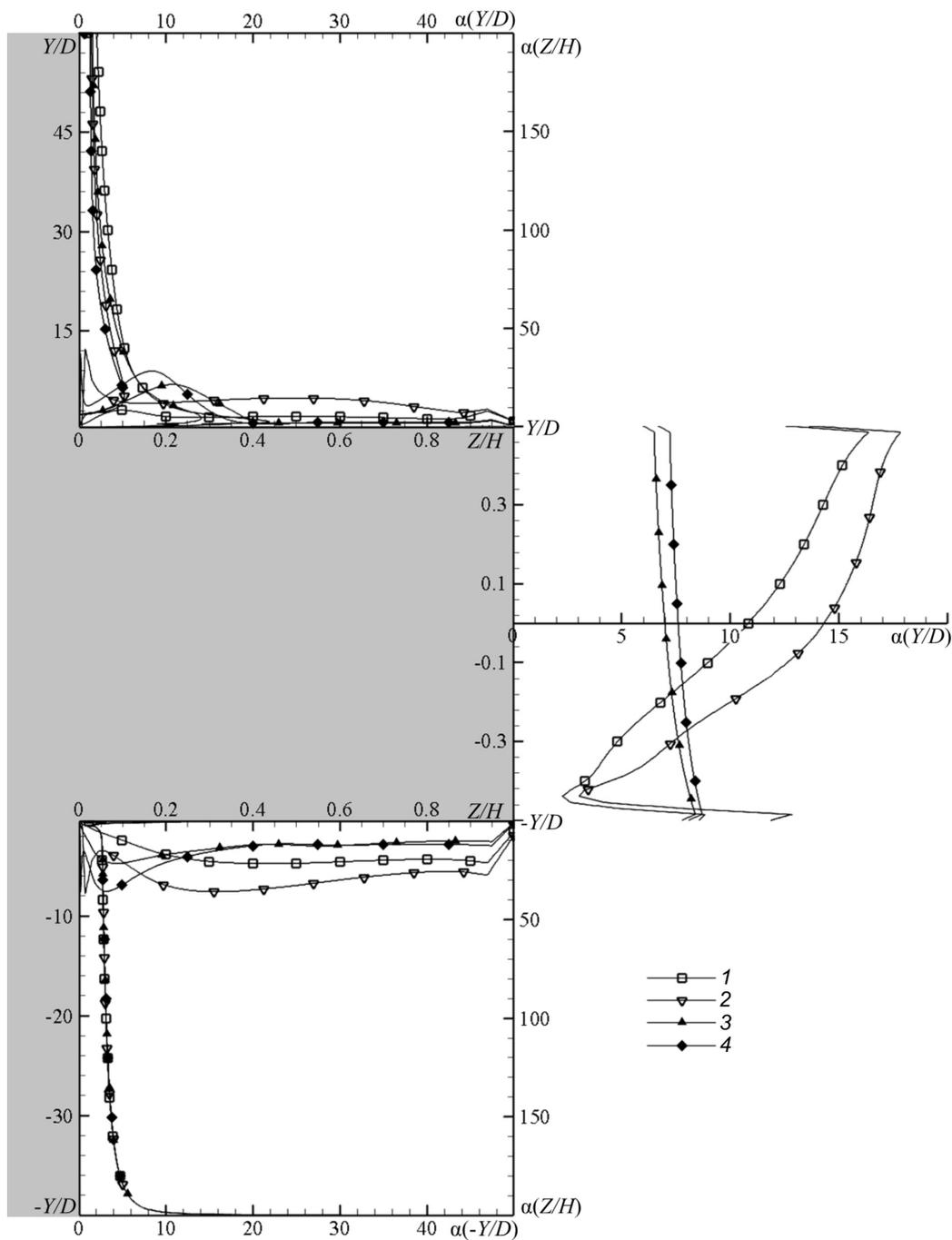


Рис. 8. Распределения коэффициента теплопередачи α вдоль линии пересечения плоскости симметрии (YZ) и твердых поверхностей для вариантов расчета В-1-60 (1), В-1-120 (2), В-5-60 (3), В-5-120 (4) (см. табл. 1)

Следует отметить, что полученные в расчетах распределения коэффициента теплопередачи в области выше по течению от цилиндра, вдали от него (т. е. в области невозмущенного свободно-конвективного

пограничного слоя), согласуются с литературными данными. Критериальная зависимость локального числа Нуссельта от локального числа Грасгофа имеет вид степенной функции с показателем, близким к



общепринятому значению $1/4$ для ламинарного режима течения вблизи вертикальной нагретой пластины [11].

Второе семейство кривых на нижнем графике соответствует распределению коэффициента теплопередачи по высоте цилиндра, вдоль его передней кромки: оси координат меняются местами в соответствии с ориентацией в пространстве. На боковой поверхности цилиндра коэффициент теплопередачи почти не меняется вдоль него, при этом средний уровень коэффициента α для короткого цилиндра слегка растет с увеличением температуры поверхности.

Следует отметить, что для цилиндров разной высоты повышение температуры поверхности приводит к ярко выраженному немонотонному изменению коэффициента α в окрестности стыка цилиндра и пластины. Данное обстоятельство, безусловно, есть следствие интенсивного развития вихревой структуры в этой области. Заметим, что подобное поведение коэффициента теплопередачи характерно и для распределения α по линии вдоль задней кромки цилиндра (см. верхний график, зависимости α (Z/H)).

На среднем графике показаны распределения величины α по диаметру верхнего торца цилиндра. Можно отметить общую тенденцию к росту коэффициента теплопередачи с увеличением температуры поверхности цилиндра. Однако, если для длинного цилиндра коэффициент α практически постоянен, то для короткого, полностью погруженного в пограничный слой, коэффициент теплопередачи увеличивается в несколько раз в направлении вниз по потоку. В области после цилиндра, вдоль поверхности пластины (верхний график, зависимость α (Y/D)), распределения коэффициента теплопередачи для разных вариантов имеют сходный вид, демонстрируя медленное, почти монотонное снижение

теплоотдачи по мере удаления от цилиндра. Уровень значений величины α снижается при увеличении как температуры поверхности цилиндра, так и его высоты.

Заключение

По результатам численного моделирования взаимодействия свободно-конвективного пограничного слоя с трехмерным препятствием (цилиндром) можно сделать следующие выводы:

предположение об образовании сложной вихревой структуры в составе с подковообразным вихрем в передней зоне цилиндра, расположенного на плоской вертикальной пластине, подтвердилось и в случае свободно-конвективного течения;

высота цилиндра оказывает существенное влияние на формирование вихревой зоны, если она соизмерима с толщиной пограничного слоя;

перегрев цилиндра по отношению к температуре пластины слабо влияет на течение вверх по потоку, но оказывает заметное воздействие на течение в следе за цилиндром;

влияние перегрева цилиндра возрастет, по-видимому, еще сильнее в случае преобладания высоты цилиндра над толщиной пограничного слоя, так как в этом случае цилиндр будет самостоятельным источником свободно-конвективного потока, который при определенных условиях может оказывать заметное влияние на течение в следе;

и, наконец (возможно, это самый важный практический вывод), теплообмен поверхности (в совокупности с цилиндром) с окружающим воздухом в значительной степени определяется вихревой структурой течения около этой поверхности, а, следовательно, успех расчета теплообмена во многом зависит от качества предсказания динамической структуры течения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Anderson C.D., Lynch S.P. Time resolved stereo-PIV measurements of the horseshoe vortex system in a low aspect ratio pin-fin array // AIAA Propulsion and Energy Forum. Orlando, FL, USA, 2015. P. 3733.

2. Ballio F., Bettoni C., Franzetti S. A survey of time-averaged characteristics of laminar and turbulent horseshoe vortices // ASME Journal of Fluids Engineering. 1998. Vol. 120. No. 2. Pp. 233–242.

3. **Apsilidis N., Diplas P., Dancy C.L., Bouratsis P.** Time-resolved flow dynamics and Reynolds number effects at a wall-cylinder junction // *Journal of Fluid Mechanics*. 2015. Vol. 776. Pp. 475–511.

4. **Visbal M.R.** Structure of laminar juncture flows // *AIAA Journal*. 1991. Vol. 29. No. 8. Pp. 1273–1282.

5. **Левченя А.М.** Численное моделирование трехмерного потока, обтекающего круговой цилиндр в области его сочленения с гладкой стенкой // *Всероссийский семинар по аэрогидродинамике, посвященный 90-летию со дня рождения С.В. Валландера: избранные труды всероссийского семинара*. СПб.: Изд. СПбГУ, 2008. С. 64–69.

6. **Polidori G., Padet J.** Flow visualization and free convection heat transfer at the junction of short cylinders mounted on a heated wall // *Journal of Flow Visualization and Image Processing*. 2003. Vol. 10. Pp. 13–26.

7. ANSYS Academic Research Mechanical,

Release 16.2, Help System, Fluent User Guide, ANSYS, Inc. 2015.

8. **Kirkil G., Constantinescu G.** Effects of cylinder Reynolds number on the turbulent horseshoe vortex system and near wake of a surface-mounted circular cylinder // *Physics of Fluids*. 2015. Vol. 27. No. 7. P. 075102.

9. **Tala J.V.S., Russeil S., Bougeard D., Harion J.L.** Investigation of the flow characteristics in a multirow finned-tube heat exchanger model by means of PIV measurements // *Experimental Thermal and Fluid Science*. 2013. Vol. 50. Pp. 45–53.

10. **Hunt J.C.R., Wray A.A., Moin P.** Eddies, stream, and convergence zones in turbulent flows // *Center for Turbulence Research Report (CTR-S88)*. 1988. Pp. 193–208.

11. **Кузьмицкий В.А., Чумаков Ю.С.** Анализ характеристик течения при ламинарно-турбулентном переходе в свободноконвективном пограничном слое // *Теплофизика высоких температур*. 1999. Т. 37. № 2. С. 239–246.

Статья поступила в редакцию 06.11.2017, принята к публикации 05.12.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧУМАКОВ Юрий Сергеевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
chumakov@yahoo.com

ЛЕВЧЕНЯ Александр Михайлович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
levchenya_am@spbstu.ru

МАЛАХ Хамид – аспирант кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
hamid.malah@gmail.com

REFERENCES

[1] **C.D. Anderson, S.P. Lynch**, Time resolved stereo-PIV measurements of the horseshoe vortex system in a low aspect ratio pin-fin array, *AIAA Propulsion and Energy Forum*. Orlando, FL, USA (2015) 3733.

[2] **F. Ballio, C. Bettoni, S. Franzetti**, A survey of time-averaged characteristics of laminar and turbulent horseshoe vortices, *ASME Journal of Fluids Engineering*. 120 (2) (1998) 233–242.

[3] **N. Apsilidis, P. Diplas, C.L. Dancy, P. Bouratsis**, Time-resolved flow dynamics and

Reynolds number effects at a wall-cylinder junction, *Journal of Fluid Mechanics*. 776 (2015) 475–511.

[4] **M.R. Visbal**, Structure of laminar juncture flows, *AIAA Journal*. 29 (8) (1991) 1273–1282.

[5] **A.M. Levchenya**, Chislennoye modelirovaniye trekhmernogo potoka, obtekeyushchego krugovoy tsilindr v oblasti yego sochleneniya s gladkoy stenкой [Numerical simulation of a 3D flow around a circular cylinder in its overlapping area with a smooth wall], In: *Vserossiyskiy seminar po aerogidrodinamike, posvyashchenny 90-letiyu so*



dnya rozhdeniya S.V. Vallandera: izbrannyye trudy vserossiyskogo seminar [The All-Russian seminar on aerodynamics on the occasion of 90th anniversary of S.V. Vallander: Selecta from The All-Russian seminar] , St. Petersburg, SPbSU (2008) 64–69.

[6] **G. Polidori, J. Padet**, Flow visualization and free convection heat transfer at the junction of short cylinders mounted on a heated wall, *Journal of Flow Visualization and Image Processing*. 10 (2003) 13–26.

[7] ANSYS Academic Research Mechanical, Release 16.2, Help System, Fluent Theory Guide, ANSYS, Inc. 2015.

[8] **G. Kirkil, G. Constantinescu**, Effects of cylinder Reynolds number on the turbulent horseshoe vortex system and near wake of a surface-

mounted circular cylinder, *Physics of Fluids*. 27 (7) (2015) 075102.

[9] **J.V.S. Tala, S. Russeil, D. Bougeard, J.L. Harion**, Investigation of the flow characteristics in a multirow finned-tube heat exchanger model by means of PIV measurements, *Experimental Thermal and Fluid Science*. 50 (2013) 45–53.

[10] **J.C.R. Hunt, A.A. Wray, P. Moin**, Eddies, stream, and convergence zones in turbulent flows, *Center for Turbulence Research Report (CTR-S88)*. (1988) 193–208.

[11] **V.A. Kuzmitskii, Yu.S. Chumakov**, Analysis of characteristics of flow under conditions of laminar-to-turbulent transition in a free-convection boundary layer, *High Temperature*. 37(2) (1999) 247–253.

Received 06.11.2017, accepted 05.12.2017.

THE AUTHORS

CHUMAKOV Yuri S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
chumakov@yahoo.com

LEVCHENYA Alexander M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
levchenya_am@spbstu.ru

MALAH Hamid

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
hamid.malah@gmail.com

DOI: 10.18721/JPM.111109

УДК 541.11

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ПРИ СФЕРИЧЕСКОМ РАСШИРЕНИИ ВОДЯНОГО ПАРА В ВАКУУМ

Н.Ю. Быков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Методом прямого статистического моделирования выполнен расчет истечения водяного пара в вакуум с учетом процессов конденсации в объеме. Рассмотрены две модели образования кластеров, основанные на кинетическом подходе и на выводах модифицированной классической теории нуклеации. Проведен анализ физической адекватности моделей и особенностей их алгоритмической реализации. Выполнены расчеты сферического расширения пара от испаряющейся поверхности в диапазоне чисел Кнудсена, соответствующем околосубзвуковому и переходному режимам течения. Проанализировано влияние процесса конденсации на газодинамические параметры течения. Продемонстрирован эффект «замораживания» мольных концентраций кластеров по мере удаления от испаряющейся поверхности.

Ключевые слова: прямое статистическое моделирование; конденсация; кластер молекул воды; переходный режим течения

Ссылка при цитировании: Быков Н.Ю. О моделирование процесса образования кластеров при сферическом расширении водяного пара в вакуум // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 86 – 101. DOI: 10.18721/JPM.111109

ON SIMULATION OF CLUSTER FORMATION PROCESS UNDER WATER VAPOR SPHERICAL EXPANSION INTO VACUUM

N.Yu. Bykov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

The calculation of a water vapor outflow into vacuum has been performed using the direct simulation Monte Carlo with taking into account a condensation process. Two cluster-formation models were employed for simulation. The former is based on a kinetic approach, the latter is based on conclusions drawn from the modified classical nucleation theory. The analysis of physical adequacy of models and features of their program implementation was carried out. The simulation of spherical vapor expansion from an evaporating surface was performed over a range of Knudsen numbers corresponding to transient and near-continual flow regimes. The influence of a condensation process on gasdynamic flow parameters was analyzed. The effect of freezing of cluster mole-fractions when receding from the evaporating source was demonstrated.

Key words: direct simulation Monte Carlo; condensation; water cluster; transient flow regime

Citation: N.Yu. Bykov, On simulation of cluster formation process under water vapor spherical expansion into vacuum, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 86 – 101. DOI: 10.18721/JPM.111109

Введение

Процессы конденсации водяного пара в расширяющихся течениях широко распространены в природе и технике. Среди природных феноменов можно выделить атмосферные явления, в том числе образование кластеров воды в потоках газа, формирующих околоядерную атмосферу комет [1]. К техническим приложениям относятся процессы конденсации водяного пара в соплах и струях [2], в том числе при работе двигателей космических летательных аппаратов на больших высотах [3].

В зависимости от характерного числа Кнудсена ($Kn = \lambda/D$, где λ – средняя длина свободного пробега молекул, D – характерный размер течения) истечение пара в вакуум является разреженным на периферии струи или во всей области течения. Для расчета разреженных течений традиционно используется метод прямого статистического моделирования (ПСМ) [4].

Интерес к моделированию процессов формирования и роста кластеров в разреженных течениях методом ПСМ возник в начале 2000-х годов в связи с бурным развитием вакуумных технологий нанесения различного рода покрытий, в том числе технологий лазерной абляции материалов. Для расчета таких течений использовались кинетические модели [5 – 8], в которых вероятности ассоциации частиц при взаимных столкновениях являлись функциями размера кластера (в простейшем случае были равны единице), а мономолекулярный распад кластера моделировался формулой теории Райса – Рамспергера – Касселя (РРК). Работы отличались детальностью описания первого этапа кластерообразования – процесса димеризации и алгоритмической реализацией РРК-формулы для мономолекулярного распада. Дальнейшее развитие методики прямого статистического моделирования течений с процессами конденсации, основанной на применении кинетической модели, имело место в работе [9], где вероятности процессов ассоциации получали, применяя подходы молекулярной динамики (МД), а также в работе [10], где был предложен точный алгоритм реализации

формулы РРК мономолекулярного распада для метода ПСМ. Скорости прямого процесса ассоциации частиц и обратного процесса распада во всех указанных работах оказываются не связанными между собой. В работе [11] предложена модель конденсации, в рамках которой вероятности роста/распада кластеров получены на основе данных о скоростях прямых и обратных реакций соответствующих процессов. Константы скоростей прямых и обратных реакций связаны через константы равновесия, которые считаются известными. Отличительными особенностями работы [11] являются оригинальные выражения для вероятности мономолекулярного распада кластеров (в частном случае они совпадают с теорией РРК) и вероятности формирования димера при трехчастичном столкновении мономеров. Указанная кинетическая модель [11] используется при получении основных результатов данной работы.

Отдельное место занимают работы [12, 13], в которых выполнен расчет ПСМ конденсации паров воды в дальнем разреженном поле струи ракетного двигателя. В данных статьях использована классическая теория нуклеации (КТН), выводы которой были адаптированы для алгоритма ПСМ.

Стремление использовать КТН для практических расчетов имеет основания. Во-первых, выводы теории довольно давно используются для описания течений с конденсацией. Расчет необходимых термодинамических параметров (давление и температура пара, степень пересыщения, скорость зародышеобразования и критический размер кластера) можно реализовать в рамках ПСМ. Во-вторых, моделирование процесса роста кластеров, начиная с момента образования критического зародыша, может дать вычислительные преимущества, так как нет необходимости в затратах вычислительного времени на моделирование процесса формирования докритических кластеров, в том числе образования димера при тройной комбинации мономеров.

Однако КТН имеет известные недостатки: использует понятие поверхностного натяжения по отношению к кластерам малого размера, предсказывает размер критическо-

го кластера меньшей единицы при больших степенях пересыщения пара. В работах [12, 13] игнорируется эффект выделения энергии связи при ассоциации частиц, а следовательно, не учитывается эффект повышения внутренней температуры кластера, сопровождающий данный процесс; не ясна также реализация алгоритма для случая больших степеней пересыщения.

С целью устранения указанных недостатков КТН, в работе [14] предложено использовать модифицированную классическую теорию нуклеации (МКТН). В рамках модели МКТН не требуется использования понятия поверхностного натяжения [15], размер критического кластера при больших степенях пересыщения равен единице. Последнее обстоятельство требует дополнительных предположений при алгоритмической реализации модели. Модель МКТН была реализована для пространственно-однородного случая конденсации пара меди [16]. Однако прямого сравнения результатов расчетов одних и тех же течений с использованием обеих моделей (на базе кинетического подхода и подхода МКТН) выполнено не было. Кроме того, не был проведен полный анализ алгоритмических возможностей реализации модели МКТН для метода ПСМ.

Одной из целей настоящей работы является сравнение результатов расчетов (рассчитывались размерные распределения получаемых кластеров, распределения газодинамических параметров по координате) с использованием двух моделей (кинетической и МКТН) на примере одного объекта исследования.

В статье также обсуждаются особенности алгоритмической реализации подхода МКТН и параметры модели МКТН, при которых указанные расчетные результаты оказываются близкими к результатам, полученным при использовании кинетического подхода.

В качестве объекта исследования в работе выбрано одномерное стационарное течение водяного пара от испаряющейся сферической поверхности. Моделирование истечения не реагирующего газа с поверхности сферы в вакуум выполнено в рабо-

тах [17, 18]. В указанных статьях рассмотрено влияние степени разреженности на газодинамику течения, проанализированы особенности формирования кнудсеновского слоя у поверхности сферы и процессы релаксации поступательных степеней свободы.

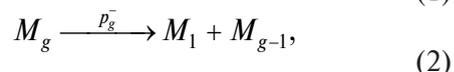
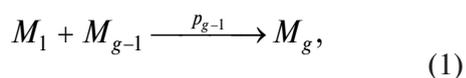
В работе [19] проведен расчет параметров кластеров в области $X < 5R$ (X – радиальная координата, R – радиус сферы) и пара на звуковой линии при истечении водяного пара от сферического источника. Для расчетов использована упрощенная модель конденсации, в которой, в частности, вероятности ассоциации частиц в ходе реакций кластеризации предполагались равными единице, а процесс испарения моделировался согласно теории РПК. Для используемых параметров модели [19] наблюдалась значительная доля кластеров в течении (до 19 %), показано существенное влияние процесса конденсации на параметры звуковой линии.

Второй целью настоящей работы является проведение серии расчетов течения от сферического источника с использованием уточненной модели конденсации, предложенной в статье [11], изучение влияния процесса кластеризации на параметры течения пара и исследование параметров формирующихся кластеров.

Модель формирования кластеров

Согласно данным работы [11], кластер воды M_g характеризуется числом мономеров g , числом поверхностных мономеров g_0 , массой m_g , диаметром d_g , поступательной скоростью v_g , внутренней энергией $E_{int,g}$, числом вращательных ($\zeta_{r,g}$) и колебательных ($Z_{v,g}$) степеней свободы, энергией испарения одного мономера с поверхности ϵ_g .

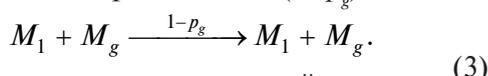
Для кластеров размера $g > 2$ рассматриваются следующие реакции образования/распада:



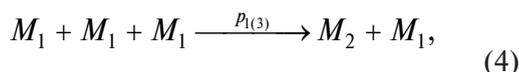
где p_{g-1} , p_g^- – вероятности ассоциации и распада соответственно.

Реакция (1) описывает присоединение мономера к кластеру при парном столкновении, а реакция (2) – мономолекулярный распад кластера. Время мономолекулярного распада кластера имеет порядок $1/\nu_0$, где ν_0 – характерная частота колебаний мономеров в кластере. Прямой процесс (1) характеризуется константой скорости K_{g-1} , обратный процесс (2) – константой скорости K_g^- .

Упругое столкновение мономер-кластер происходит с вероятностью $(1-p_g)$:

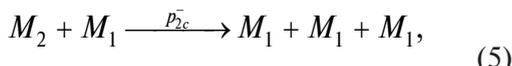


В рамках рассматриваемой модели димеры воды образуются в результате трехчастичных столкновений:



где $p_{1(3)}$ – соответствующая вероятность.

Обратная реакция происходит по схеме:



где p_{2c}^- – вероятность столкновительного распада.

Скорости прямой (4) и обратной (5) реакций обозначим как $K_{1(3)}$ и K_{2c}^- соответственно.

Модель на базе модифицированной классической теории нуклеации

Отличительными чертами модели на базе МКТН являются необходимость расчета в каждой вычислительной ячейке размера критического кластера g_* и скорости процесса зародышеобразования (нуклеации) J , которые являются функциями термодинамических параметров.

В рамках модели МКТН скорость нуклеации определяется следующим образом [2, 15]:

$$J = 1 / \sum_{g=2}^{\infty} R_g^{-1}, \quad R_g = K_{g-1} n_1 n_{g-1}^e, \quad (6)$$

где n_g – концентрация g -меров; K_{g-1} – константы скоростей процессов (1) и (4) для $g > 2$ (в случае формирования димеров воды в ходе реакции (4) $K_1 = K_{1(3)} n_1$); верхний индекс e означает равновесную концентрацию, $n_1^e = n_1$.

цию, $n_1^e = n_1$.

Заданной степени пересыщения S соответствует определенный критический размер кластера g_* [2, 15]. В диапазоне $S < S_{\min}$ критический размер оказывается равным критическому размеру, определенному согласно классической теории нуклеации (КТН) [2]; в диапазоне $S_{\min} < S < S_{\max}$ этот размер равен координационному числу N_c , а для случая $S > S_{\max}$ $g_* = 1$. Величины S_{\max} и S_{\min} определены в работах [14, 15]. Знание критического размера кластера необходимо для определения величины J , так как кластеры околокритического размера вносят основной вклад в сумму в выражении (6).

После определения значений J и g_* вычислительный алгоритм на базе подхода МКТН сводится к вбросу кластеров в ячейку со скоростью J . Определение размера вбрасываемых кластеров является первой отличительной особенностью алгоритма, базирующегося на МКТН. В работах [12, 13] в ячейку вбрасывались кластеры критического размера g_* . Вброс кластеров размера $g_* > 2$ в ячейку приводит к «усеченности» реального размерного распределения кластеров. В этом случае предполагается, что концентрации докритических кластеров в ячейке соответствуют равновесному распределению. Такая ситуация требует дополнительного моделирования распределения докритических кластеров в рамках метода ПСМ (в работах [12, 13] эта проблема не рассматривалась) и изменения вычислительного алгоритма. С другой стороны, при $S \gg 1$, в рамках подхода МКТН, $g_* = 1$ (классическая теория нуклеации предсказывает в этом случае, что $g_* < 1$). Вброс мономеров в ячейку лишен смысла. Поскольку в рамках КТН скорости образования кластеров любого размера равны скорости нуклеации J [2], возможен вброс в ячейку кластеров околокритического размера или докритического размера g_a [14]. Оптимальным является выбор размера кластера $g_a = 2$, так как, с одной стороны, в любой ячейке должно воспроизводиться распределение кластеров по размерам (начиная с димера), а с другой – решается проблема вброса кластеров при $S \gg 1$. Именно такой подход используется в на-

стоящей работе.

Второй отличительной особенностью алгоритма на базе МКТН является исключение реакций образования кластеров размера g_a (при ассоциации мономера и кластера размера $(g_a - 1)$) и их распада из вычислительного алгоритма, так как оба процесса входят в скорость зародышеобразования J [2].

Третьей отличительной особенностью вычислительного алгоритма на базе МКТН является необходимость определения температуры пара для розыгрыша процесса испарения. В стандартном случае для розыгрыша столкновений и передвижения молекул, в рамках метода ПСМ, определения макроскопических параметров на каждом временном шаге не требуется. Модели, базирующиеся на МКТН или КТН, являются однотемпературными, т. е. предполагают, что поступательные и внутренние температуры мономеров и кластеров равны. Такой подход требует использования одной температуры для определения констант скоростей роста и распада кластеров. Это может быть либо поступательная температура мономеров T_1 , либо температура T_{tot} – усредненная по поступательным и внутренним энергиям частиц в ячейке [11]. Но с одной стороны, при $n_1 \gg n_g$ усредненная температура T_{tot} оказывается близкой к поступательной температуре мономеров T_1 , и так же, как и T_1 , не отражает реальной внутренней энергии индивидуального кластера g . С другой стороны, реализация алгоритма, связанная с использованием величины T_{tot} , требует внесения некорректных (с физической точки зрения) изменений в основной столкновительный блок программы, так как число столкновений в ячейке зависит от температуры. С учетом изложенных обстоятельств, в настоящей работе для определения скоростей реакций используется температура мономеров T_1 .

Следует отметить, что возможна реализация смешанного алгоритма (она также рассматривается в настоящей работе), при котором димеры вбрасываются в поле течения согласно алгоритму МКТН, а даль-

нейший процесс испарения кластеров рассматривается аналогично кинетическому подходу (вероятность испарения мономера из кластера зависит от внутренней температуры индивидуального кластера). Однако такую вычислительную модель следует признать некорректной с точки зрения основ КТН.

Кинетический подход к построению модели

В рамках кинетического подхода не требуется дополнительных предположений о размере вбрасываемых в вычислительную ячейку кластеров и вычисления скорости нуклеации. Процесс кластеризации стартует с формирования димеров в соответствии с реакцией (4).

Вероятности протекания реакций в случае известных констант скоростей определяются с использованием модели полной энергии столкновения (Total Collision Energy, TCE) [4, 20, 21]. Основой данной модели является предположение о том, что соответствующие вероятности могут быть заданы в виде

$$p = L \frac{(E_{tot} - \varepsilon)^{Y + \zeta_{tot}/2 - 1}}{E_{tot}^{\zeta_{tot}/2 - 1}}, \quad (7)$$

где E_{tot} – полная энергия; ζ_{tot} – полное число степеней свободы; ε – энергия активации; L , Y – константы, зависящие от параметров модели упругих столкновений частиц и параметров констант скоростей реакций.

Для определения параметров L и Y в выражении (7) необходимо задать константы скоростей реакций в аррениусовском виде:

$$K = AT^B \exp(-\varepsilon/kT)$$

(k – постоянная Больцмана); константы A , B и энергия активации ε полагаются известными.

Следует обратить внимание на то обстоятельство, что кинетическая модель лишена недостатков модели МКТН. Она не требует определения макроскопической температуры в ячейке и ввода дополнительных предположений о размере кластеров, «вбрасываемых» в ячейку, и их параметров.

Постановка задачи

В настоящей работе ставится задача расчета сферического стационарного расширения водяного пара в вакуум с поверхности сферы радиуса R . Расчет выполнен с помощью метода прямого статистического моделирования и учитывает процесс конденсации пара в объеме.

Рассматриваемая задача является одномерной, с единственной радиальной координатой X . Однако реализация метода ПСМ требует розыгрыша всех трех компонент скорости частиц: радиальной v_x и двух перпендикулярных ей компонент $-v_\theta$ и v_ϕ . Температура источника T_0 полагается постоянной. С поверхности испаряются только мономеры (молекулы) воды. Для описания испарения используется закон Герца – Кнудсена, в соответствии с которым поток F^+ испаряющихся молекул равен

$$F^+ = n_0 v_0 / 4,$$

где n_0 – концентрация насыщенного пара (соответствует равновесному давлению, определенному по T_0); v_0 – средняя тепловая скорость испаряющихся частиц;

$$v_0 = (8kT_0/\pi m_1)^{1/2}$$

(m_1 – масса мономера).

Равновесное давление пара $p_0(T)$ опре-

деляется аналогично тому, как это сделано в работе [22]. Остальные параметры водяного пара соответствуют приведенным в статье [23]. Предполагается, что функция распределения для молекул воды, улетающих с поверхности, является полумаксвелловской [19].

Для рассматриваемого диапазона температур источника колебательные степени свободы испаряющихся молекул воды считаются замороженными [24]. Внутренняя энергия улетающих с поверхности мономеров равна вращательной энергии

$$E_{int,1} = (\zeta_{r,1} / 2) k T_0.$$

Для розыгрыша энергообмена между поступательными и внутренними степенями свободы используется модель Ларсена – Боргнакке [4]. Вероятность обмена энергией между вращательными и поступательными степенями свободы молекул воды при взаимных столкновениях принята равной единице. Вероятности обмена энергией между поступательными и внутренними степенями свободы при столкновении класса мономер-кластер приняты равными 0,1 [10]. Формирование кластеров в поле течения происходит согласно вышеописанной модели конденсации. Константы скоростей реакций, а также параметры моделей столкновений взяты из работы [25].

Таблица 1

Варианты расчета сферического стационарного расширения водяного пара в вакуум

| Номер варианта | База модели | Учет конденсации | Число Кнудсена |
|----------------|------------------------------|------------------|----------------|
| 1 | – | – | 10^{-4} |
| 2 | КП | + | 10^{-4} |
| 3 | – | – | 10^{-2} |
| 4 | КП | + | 10^{-2} |
| 5 | МКТН | + | 10^{-4} |
| 6 | МКТН + КП (для испарения) | + | 10^{-4} |

Примечания. 1. Температура источника одинакова для всех вариантов: $T_0 = 350$ К. 2. Число Кнудсена $Kn = \lambda_0 / (2R)$, где λ_0 – средняя длина свободного пробега, R – радиус сферы.

Сокращения: МКТН – модифицированная классическая теория нуклеации, КП – кинетический подход.

Молекулы и кластеры, достигающие внешней границы области, исключались из расчета (гиперзвуковое граничное условие). Также исключались из расчета частицы, пересекающие границу источника в обратном направлении (условие полной конденсации на поверхности).

В рассмотренной постановке газодинамическая картина течения определяется числом Кнудсена

$$Kn = \lambda_0 / D = \lambda_0 / (2R),$$

где λ_0 – средняя длина свободного пробега молекул воды, соответствующая параметрам n_0 и T_0 ; D – диаметр сферы, а также характерными скоростями реакций (1), (2), (4), (5).

Варианты расчета и значения определяющих параметров представлены в табл. 1.

Расчеты выполнены методом ПСМ со схемой столкновений без временного счетчика [4], с помощью разработанного программного комплекса на кластере «Политехник – РСК Торнадо» в Суперкомпьютерном центре «Политехнический».

Результаты расчетов и их обсуждение

На рис. 1 представлены результаты моделирования – данные об изменении нормализованных величин концентрации, скорости и температуры пара в поле течения. Плотность пара падает по мере удаления от поверхности, асимптотически стремясь к нулю; при этом скорость газа растет (рис. 1, а). В случае истечения в режиме сплошной среды ($Kn = 0$) скорость стремится к своему термодинамическому пределу стационарного расширения

$$u = (2 / (\gamma - 1))^{1/2} a_0,$$

где γ – показатель адиабаты; a_0 – скорость звука, определенная по температуре T_0 [26].

В случае свободномолекулярного разлета ($Kn \rightarrow \infty$) скорость пара стремится к тепловой скорости, определенной по равновесной температуре пара [27]:

$$u_{\max} = v_0.$$

Теплосодержание пара падает до нуля для сплошно-среднего течения [26].

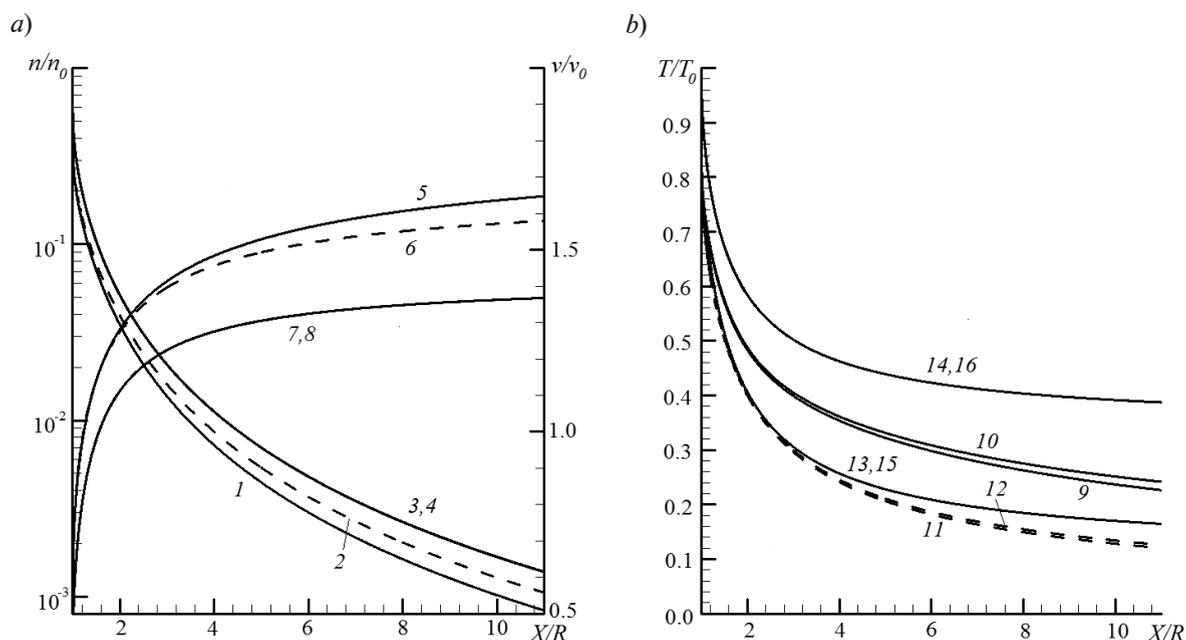


Рис. 1. Расчетные распределения плотности (кривые 1 – 4) и скорости (5 – 8) (а), а также температуры (б) пара мономеров. Представлена температура поступательных (9, 11, 13, 15) и внутренних (10, 12, 14, 16) степеней свободы. Расчеты проведены с учетом (1, 3, 5, 7, 9, 10, 13, 14) и без учета (2, 4, 6, 8, 11, 12, 15, 16) процессов кластеризации. $Kn = 10^{-4}$ (1, 2, 5, 6, 9 – 12) и 10^{-2} (3, 4, 7, 8, 13 – 16)

В случае свободномолекулярного течения температура газа падает до величины [27]:

$$T / T_0 = 1 - 8 / (3\pi)$$

Уменьшение степени разреженности течения (уменьшение числа Кнудсена) приводит к большему числу столкновений между частицами и более эффективному переходу тепловой энергии в энергию направленного движения частиц. В результате скорость газа для более плотного режима течения ($Kn = 10^{-4}$) возрастает по отношению к более разреженному варианту ($Kn = 10^{-2}$), а плотность и температура уменьшаются по мере удаления от источника.

Следует обратить внимание на результат, который показывает, что увеличение числа Кнудсена ведет к нарушению равновесия между поступательными и внутренними степенями свободы [17, 18]. Для $Kn = 10^{-4}$ различие между соответствующими компонентами температуры в рассматриваемой области незначительно. Однако уже для чисел Кнудсена порядка 0,01 различие между компонентами становится существенным.

Учет конденсации в расчетах приводит к двум эффектам:

выделение энергии скрытой теплоты конденсации в поток. В рассматриваемой модели энергия связи при ассоциации частиц выделяется во внутренние степени свободы кластеров размера $g > 2$ (см. реакцию (1)), а также в поступательные и внутренние степени свободы мономера и димера при тройной рекомбинации мономеров в ходе реакции (4);

естественная убыль мономеров в процессе формирования и роста кластеров в течении.

Процесс конденсации, ввиду указанных выше факторов, способствует росту скорости, температуры и более быстрому падению плотности пара в течении. На рис. 1 данный эффект хорошо заметен для варианта расчета ($Kn = 10^{-4}$), для которого объемная доля кластеров составляет 5,4 %. Для числа Кнудсена 0,01 объемная доля кластеров в течении оказывается менее 0,2 % и влияние процесса конденсации на газодинамику течения отсутствует.

У испаряющейся поверхности влияние процесса кластерообразования на распределения плотности и скорости даже для значения $Kn = 10^{-4}$ является незначительным (см. рис. 1). Так, параметры пара на звуковой линии для вариантов расчета с учетом и без учета процесса кластерообразования отличаются на величину менее 3 % (табл. 2). Влияние процесса конденсации на параметры звуковой линии оказалось слабее, по сравнению с результатами, полученными в работе [19]. Положение звуковой линии в вариантах с учетом и без учета конденсации составляет $48,8\lambda_0$ и $44,4\lambda_0$ от испаряющейся поверхности соответственно (для $Kn = 10^{-4}$). С увеличением расстояния от поверхности влияние процесса конденсации на параметры течения (особенно на температуру) возрастает.

Особенностью рассматриваемого класса разреженных течений является его поступательная неравновесность, возрастающая с увеличением числа Кнудсена. При любом

Таблица 2

Результаты расчета параметров пара на звуковой линии

| Номер варианта | Учет конденсации | n/n_0 | T/T_0 | Доля обратного потока, % |
|----------------|------------------|---------|---------|--------------------------|
| 1 | – | 0,316 | 0,793 | 19,3 |
| 2 | + | 0,307 | 0,803 | 19,5 |

Примечание. Представлены результаты при значении числа Кнудсена $Kn = 10^{-4}$. Номера вариантов соответствуют номерам табл. 1

Обозначения: n/n_0 – нормализованная концентрация пара, T/T_0 – нормализованная температура пара.

значении числа Кнудсена области поступательной неравновесности (область, в которой компоненты T_x , T_θ , T_ϕ поступательной температуры T_{tr} различны) находятся как непосредственно у испаряющейся поверхности (кнудсеновский слой с толщиной порядка нескольких длин свободного пробега молекул), так и на некотором удалении от поверхности, когда локальный средний размер свободного пробега частиц становится большим по отношению к характерному размеру течения [18]. Данные рис. 2, а демонстрируют размеры слоя Кнудсена у поверхности. Размер слоя можно определить, исходя из необходимости одновременного выполнения следующих двух условий [18, 19]:

$$\frac{|T_x - T_\theta|}{T} \cdot 100\% < 3\%;$$

$$\frac{|T_{tr} - T_{int}|}{T} \cdot 100\% < 3\%,$$

где T_{int} — температура внутренних степеней свободы.

Полученная толщина слоя составляет $40\lambda_0$ и практически не зависит от учета процесса конденсации.

В случае свobodномолекулярного разлета областью поступательной неравновесности является вся зона течения [27]. Для варианта расчета при $\text{Kn} = 10^{-2}$ различие между компонентами температуры T_x и $T_\theta = T_\phi$ наблюдается также в большей области течения (рис. 2, б), а для случая $\text{Kn} = 10^{-4}$ — только в дальнем поле струи. В итоге учет процесса конденсации заметного влияния на степень неравновесности течения не оказывает.

Наличие зон неравновесности (по поступательным и внутренним степеням свободы) служит одним из аргументов в пользу кинетического подхода при выборе метода расчета, так как в нем не требуется вычисления температуры пара для определения вероятностей рассматриваемых реакций.

Отдельного рассмотрения заслуживает случай расчета течения, в котором учитывается конденсация с использованием подхода МКТН. На рис. 3 представлены расчетные данные об изменении степени пересыщения, критического размера кластера и скоростей нуклеации в зависимости от координаты, полученные для расчетного варианта 5 (расчет, учитывающий процесс кластерообразования, для кото-

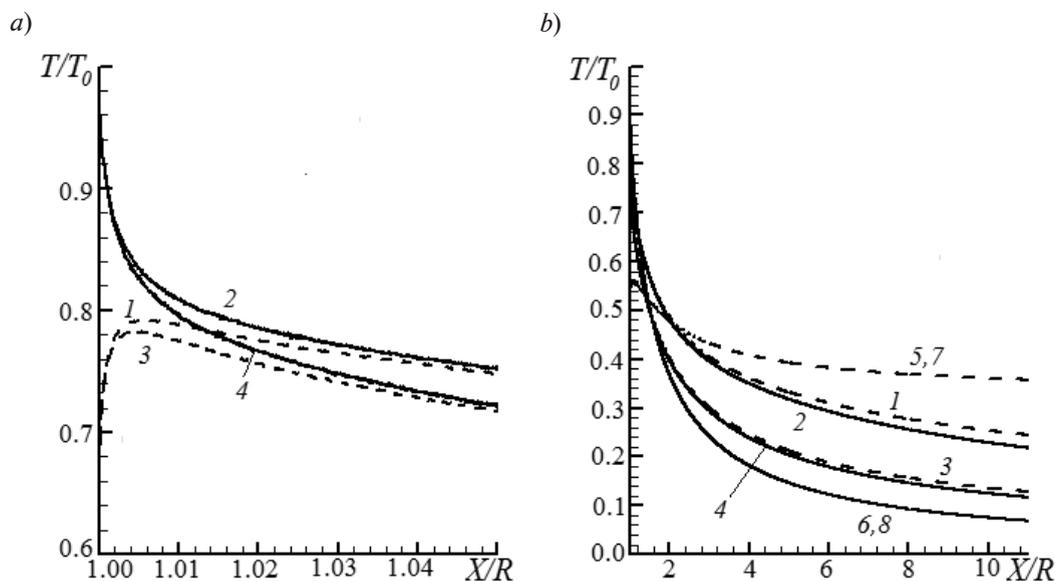


Рис. 2. Поступательная неравновесность у поверхности сферы (а) и в поле течения (б). Приведены данные для компонент температуры T_x (1, 3, 5, 7); $T_\theta = T_\phi$ (2, 4, 6, 8) при значениях $\text{Kn} = 10^{-4}$ (1 – 4) и 10^{-2} (5 – 8). Расчеты проведены с учетом (1, 2, 5, 6) и без учета (3, 4, 7, 8) процессов кластеризации

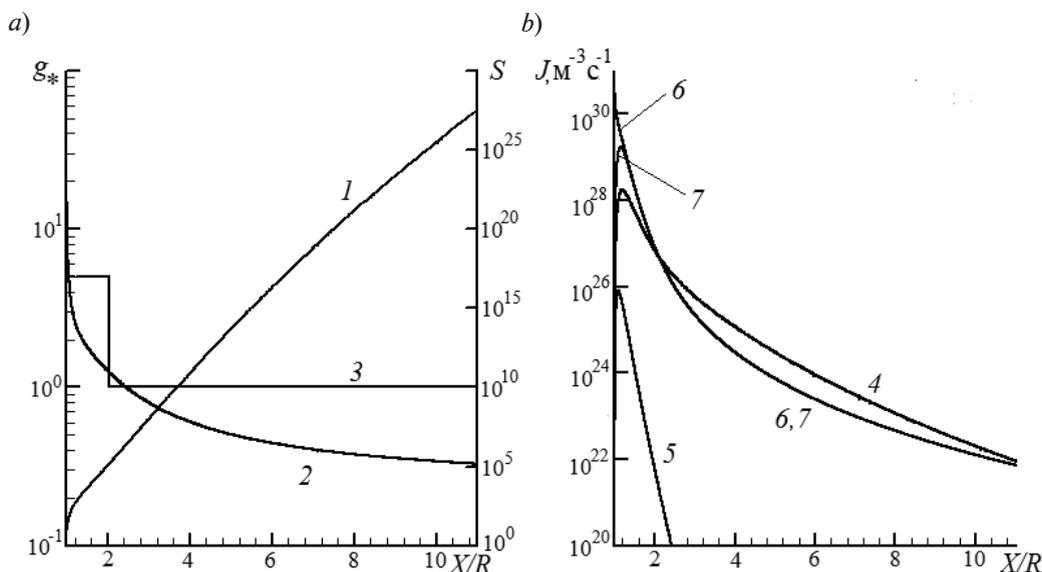


Рис. 3. Зависимости степени пересыщения S (1) и критического размера кластера g_* (2, 3) (a), а также скорости зародышеобразования (4, 5, 7) и R_2 (6) (b) от координаты для чисел Кнудсена $Kn = 10^{-4}$ (модель MKTN). Представлены величины g_* (оценка по КТН и на базе MKTN – кривые 2 и 3 соответственно), J_{clas} (4), J_K (5), расчетное значение J (7)

рого использована модель на базе MKTN, см. табл. 1). У поверхности источника $1,00 < X/R < 1,05$ степень пересыщения пара мала (см. рис. 3, a), размер критического кластера $g_* \gg 1$ и совпадает для случая совместного применения КТН и MKTN. По мере удаления от источника происходит быстрый рост степени пересыщения, и, как следствие, – уменьшение критического размера кластеров. КТН предсказывает для рассматриваемого случая значения степени пересыщения менее единицы уже на расстояниях порядка одного радиуса от источника.

Подход MKTN предсказывает величину $g_* = N_c$ на расстояниях $1,05 < X/R < 1,90$ (кривая 3 на рис. 3, a) от поверхности источника. Далее с увеличением координаты X/R величина g_* становится равной единице.

Соответствующие рассматриваемым вариантам скорости зародышеобразования представлены на рис. 3, b. Довольно большой размер критического кластера непосредственно у поверхности источника при малых значениях равновесной концентрации n_{g^*} предопределяет малые значения скорости зародышеобразования. Далее ве-

личина скорости зародышеобразования, определенная по формуле (1) для MKTN, совпадает со скоростью процесса димеризации в ходе тройных столкновений мономеров. Скорость зародышеобразования J_{clas} , определенная по формуле КТН [2], и

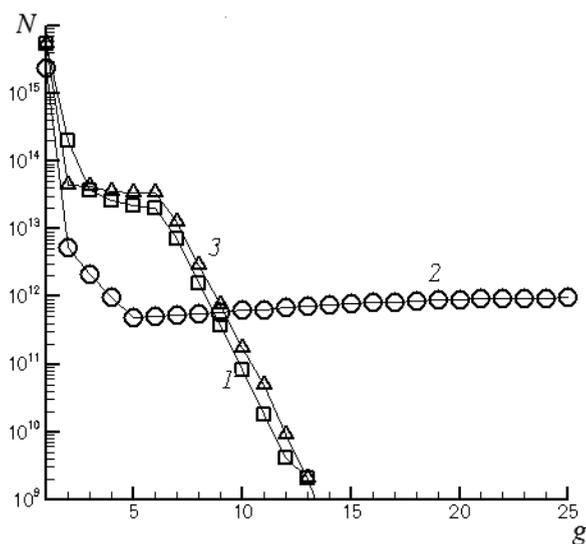


Рис. 4. Распределения кластеров по размерам в поле течения, полученные по расчетным вариантам 2 (кривая 1), 5 (2) и 6 (3)

скорость с поправкой Куртзи $J_K = J_{clas}/S$ существенно отличаются от значений J , полученных в рамках модели МКТН.

Интегральные по рассматриваемому объему течения распределения кластеров по размерам для варианта расчета $Kn = 10^{-4}$ представлены на рис. 4. Для вариантов расчета, использующих модели, базирующиеся на МКТН и на кинетическом подходе, получены принципиально различные результаты. При кинетическом подходе частота испарения мономера из кластера определяется индивидуально для каждого кластера и зависит от значения внутренней энергии этого кластера. В ходе реакции (4) часть, а для реакции (1) вся энергия связи перераспределяются во внутренние степени свободы кластера. Для поведения кластеров, полученного расчетом при кинетическом подходе, характерно довольно интенсивное испарение, а их максимально достижимый размер в представленных расчетах ограничен четырнадцатью мономерами. Согласно расчетам на базе МКТН, кластеры испаряются с температурой, равной поступательной температуре пара мономеров. При этом скорость роста кластеров оказывается

существенно выше скорости их испарения. В итоге число кластеров с размерами $g \gg 1$ слабо меняется с ростом величины g .

На рис. 4 также приведены данные расчетного варианта 6 (см. табл. 1), для которого вброс критических кластеров в ячейку был реализован на базе модели МКТН, а процесс испарения каждого кластера зависел от его индивидуальной внутренней температуры (как для кинетического подхода). Видно, что использование такого подхода существенно сближает результаты с таковыми, полученными на основе кинетической модели.

Распределение плотности и мольной доли кластеров по координате приведено на рис. 5 для числа Кнудсена 10^{-4} . Димеры ($g = 2$) формируются в непосредственной близости от поверхности источника. Максимумы на распределениях пентамеров ($g = 5$) смещены от поверхности. Расстояние от максимума на распределении до источника увеличивается с ростом размера кластера. На рис. 5, *b* приведены данные о распределениях по координате мольной доли кластеров размером $g = 2, 3$ и 5. Представленные результаты свидетельствуют о

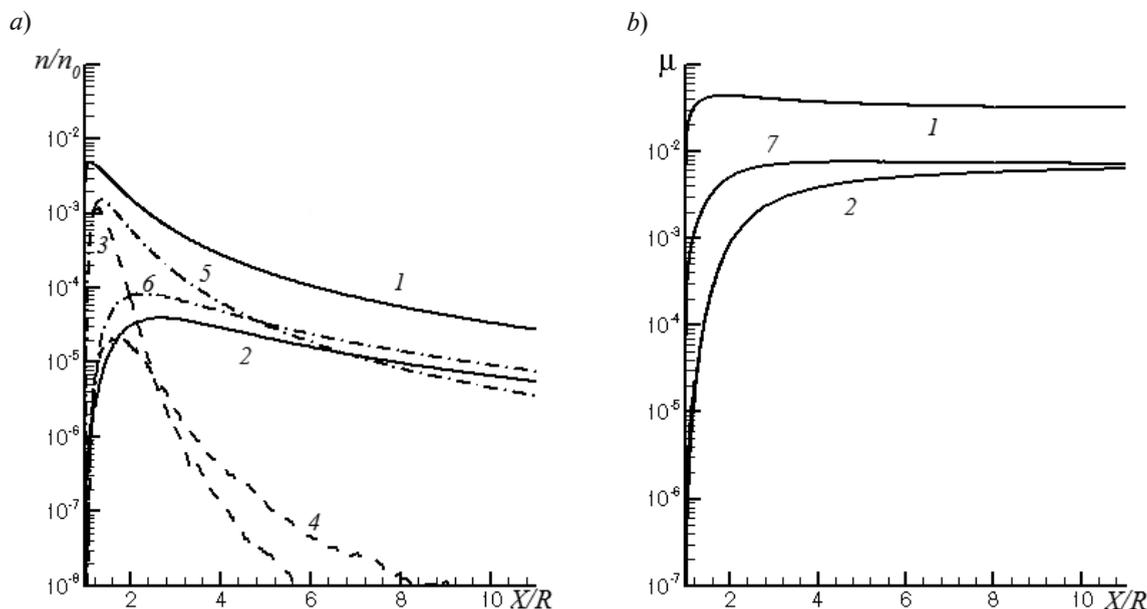


Рис. 5. Распределение концентрации (а) и мольной доли (б) кластеров по радиальной координате для кластеров разного размера g . Расчеты проведены на базе кинетического подхода (1, 2, 7), на базе МКТН (3, 4) и согласно варианту 6 (5, 6); $g = 2$ (1, 3, 5), 3 (7) и 5 (2, 4, 6).
Число Кнудсена $Kn = 10^{-4}$

замораживании мольных долей, начиная с некоторой координаты, зависящей от размера кластера. В силу малости скорости нуклеации J вблизи источника, концентрации димеров у поверхности, получаемые в рамках прямого статистического моделирования на базе МКТН, малы по отношению к получаемым концентрациям на базе кинетического подхода, а максимум распределения димеров оказывается смещенным от поверхности на величину $0,25R$.

Концентрации пентамеров в большей части течения оказываются существенно меньшими аналогичных концентраций, полученных при использовании модели, основанной на кинетическом подходе. В случае варианта 6 (модель МКТН, а испарение рассматривается в соответствии с кинетическим подходом) распределения концентраций димеров и пентамеров оказываются ближе к результатам расчета на основе кинетического подхода (вариант 5), однако совпадения данных не наблюдается.

Следует отметить, что результаты, полученные с использованием модели [11], отличаются от таковых работы [19]. Размерные

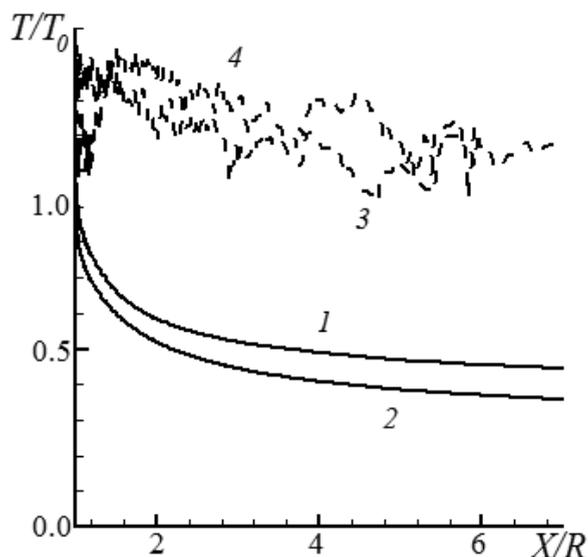


Рис. 6. Распределения внутренней температуры частиц по радиальной координате для кластеров двух размеров: димеров (кривые 1, 3) и тримеров (2, 4). Расчеты проведены на базе кинетического подхода (1, 2) и на базе МКТН (3, 4)

распределения кластеров имеют максимум, соответствующий размеру димера.

Поступательные скорости формирующихся кластеров для варианта расчета при $Kn = 10^{-4}$ совпадают со скоростью мономеров. Внутренние температуры кластеров представлены на рис. 6. Эти температуры димеров и тримеров оказываются выше поступательной температуры за счет выделения скрытой теплоты конденсации в поток в ходе процесса роста кластеров. Процесс роста сопровождается процессом испарения кластеров, в ходе которого энергия связи поглощается. В рамках модели на основе кинетического подхода скорость испарения каждого кластера зависит от его собственной внутренней температуры и указанная скорость оказывается сопоставимой со скоростью роста. В результате процесс испарения приводит к умеренному различию поступательных и внутренних температур кластеров и ограниченному максимальному размеру кластера (см. рис. 4). Для модели МКТН скорость испарения определяется поступательной температурой мономеров. Определяющим процессом при использовании модели МКТН становится процесс роста. Скорость процесса испарения кластеров, уменьшающая их внутреннюю энергию, мала по отношению к скорости их роста. В итоге наблюдается рост кластеров больших размеров ($g \gg 1$), а энергия, которая выделяется в ходе этого процесса, накапливается во внутренних степенях свободы. Внутренняя температура кластеров, полученных в расчетах с использованием модели МКТН, оказывается большей, чем внутренние температуры кластеров, которые предсказывает кинетическая модель конденсации (см. рис. 6).

Заключение

В работе методом прямого статистического моделирования выполнен расчет истечения водяного пара в вакуум с поверхности сферического источника с учетом образования кластеров в поле течения. Для расчетов использованы две модели процесса кластерообразования:

основанная на выводах модифицированной классической теории нуклеации;

базирующаяся на кинетическом подходе.

Одним из основных недостатков модели МКТН является ее однотемпературность. В рамках данного подхода не удастся правильно описать процессы испарения мономеров из кластеров. Реализация модели в вычислительном алгоритме является сложной и требует введения дополнительных предположений. Результаты расчетов основных характеристик процесса кластерообразования (пространственное распределение концентрации кластеров, распределение кластеров по размерам в поле течения), полученных с использованием модели МКТН, существенно отличаются от результатов, полученных с помощью модели на основе кинетического подхода.

Кинетическая модель свободна от всех недостатков модели МКТН. В рамках указанного подхода возможно получение вероятностей роста/испарения кластеров как функций индивидуальных параметров сталкивающихся/распадающихся частиц, что полностью соответствует основам метода ПСМ. Для моделирования процесса конденсации не требуется определять температуру пара в ячейке. С методической точки зрения, использование модели, основанной на кинетическом подходе, является оправданным.

Расчеты процесса конденсации водяного пара при истечении со сферической поверхности в вакуум на основе кинетической модели в околоконтинуальных и переходных по числу Кнудсена режимах показывают отсутствие влияния процесса конденсации на газодинамические параметры течения при степенях кластеризации

менее 1 %. Для околоконтинуальных режимов ($Kn = 10^{-4}$) степень кластеризации становится ощутимой (5,4 %). В этом случае процесс выделения скрытой теплоты конденсации в поток приводит к более быстрому росту скорости и температуры газа, падению его плотности. Особенно сильное влияние процесс кластерообразования оказывает на распределения поступательных и внутренних температур пара. Однако даже для варианта расчета, соответствующего $Kn = 10^{-4}$, процесс конденсации не оказывает существенного влияния на параметры звуковой линии, размер кнудсеновского слоя и степень поступательной неравновесности по отношению к соответствующим результатам расчета, в котором не учитывается процесс конденсации. Максимальная концентрация кластеров в поле течения соответствует размеру димера.

В работе показано наличие эффекта «замораживания» мольных долей кластеров по мере удаления от поверхности источника. Для кластеров большего размера эффект наблюдается на больших расстояниях от испаряемой поверхности. Скорости и поступательные температуры кластеров, формирующихся в течении, оказываются близкими к соответствующим параметрам мономеров. Выделение энергии связи в процессе ассоциации частиц приводит к большим значениям внутренних температур кластеров по отношению к внутренней температуре мономеров.

Работа поддержана Проектом № 16.8549.2017/8.9 Министерства образования и науки России.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Crifo J.F. Water clusters in the coma of comet Halley and their effect on the gas density, temperature, and velocity // *Icarus*. 1990. Vol. 84. No. 2. Pp. 414–446.
2. Стернин Л.Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М.: Машиностроение, 1974. 212 с.
3. Платов Ю.В., Семенов А.И., Филиппов Б.П. Конденсация продуктов сгорания в выхлопной струе ракетных двигателей в верхней атмосфере // *Геомагнетизм и аэрономия*. 2011. Т. 51. № 4. С. 556–562.
4. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarenton Press, 1994. 458 p.
5. Briehe B., Urbassek H.M. Monte Carlo simulation of growth and decay processes in a cluster aggregation source // *J. Vac. Sci. Technol. A*. 1999. Vol. 17. No. 1. Pp. 256–265.
6. Zeifman M.I., Garrison B.J., Zhigilei L.V. Combined molecular dynamics direct simulation Monte Carlo computation study of laser ablation plume evolution // *J. Appl. Phys.* 2002. Vol. 92. No. 4. Pp. 2181–2193.
7. Быков Н.Ю., Лукьянов Г.А. Прямое статистическое моделирование импульсной лазер-

ной абляции металлов с процессами кластеризации в испаренном облаке // Теплофизика и аэромеханика. 2006. Т. 13. № 4. С. 569–582.

8. **Itina T.E., Gouriet K., Zhigilei L.V., Noel S., Hermann J., Sentis M.** Mechanisms of small clusters production by short and ultra-short pulse laser ablation // Appl. Surf. Sci. 2007. Vol. 253. No. 19. Pp. 7656–7661.

9. **Li Z., Zhong J., Levin D.A., Garrison B.J.** Development of homogeneous water condensation models using molecular dynamics // AIAA Journal. 2009. Vol. 47. No. 5. Pp. 1241–1251.

10. **Jansen R., Wysong I., Gimelshein S., Zeifman M., Buck U.** Nonequilibrium numerical model of homogeneous condensation in argon and water vapor expansions // J. Chem. Phys. 2010. Vol. 132. No. 24. P. 244105.

11. **Bykov N.Yu., Gorbachev Yu.E.** Mathematical models of water nucleation process for the Direct Simulation Monte Carlo method // Applied Mathematics and Computation. 2017. Vol. 296. No. (1 March). Pp. 215–232.

12. **Zhong J., Zeifman M.I., Gimelshein S.F., Levin D.A.** Modeling of homogeneous condensation in supersonic plumes with the DSMC method // AIAA Paper. 2004. 42nd Aerospace Sciences Meeting. Jan. 5 – 8, Reno, Nevada. 2004-0166.

13. **Zhong J., Zeifman M.I., Gimelshein S.F., Levin D.A.** Direct simulation Monte Carlo modeling of homogeneous condensation in supersonic plumes // AIAA Journal. 2005. Vol. 43. No. 8. Pp. 1784–1796.

14. **Быков Н.Ю., Горбачев Ю.Е.** Прямое статистическое моделирование процессов формирования кластеров в газовой фазе: классический подход с поправкой на размер кластера // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53. № 2. С. 291–300.

15. **Zhukhovitskii D.I.** Size-corrected theory of homogeneous nucleation // J. Chem. Phys. 1994. Vol. 101. No. 6. Pp. 5076–5080.

16. **Bykov N.Y., Gorbachev Y.E.** Comparative analysis of condensation models within DSMC // AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. No. 1. Pp. 139–147.

17. **Булгакова Н.М., Плотников М.Ю., Ребров А.К.** Моделирование стационарного расширения газа с поверхности сферы в вакуум // Механика жидкости и газа. 1997. № 6. С. 137–143.

18. **Лукьянов Г.А., Ханларов Гр.О.** Стационарное расширение паров воды с поверхности сферы в вакуум // Теплофизика и аэромеханика. 2000. Т. 7. № 4. С. 511–521.

19. **Быков Н.Ю.** Моделирование процесса конденсации при сферическом расширении водяного пара в вакуум // Теплофизика и аэромеханика. 2009. Т. 16. № 2. С. 189–199.

20. **Bird G.A.** Simulation of multi-dimensional and chemically reacting flows // Rarefied Gas Dynamics. Ed. By R. Campargue. Commissariat a Lenergie Atomique. Paris. Vol. 1. 1979. Pp. 365–388.

21. **Gimelshein S.F., Gimelshein N.E., Levin D.A., Ivanov M.S., Wysong I.J.** On the use of chemical reaction rates with discrete internal energies in the direct simulation Monte Carlo method // Physics of Fluids. 2004. Vol. 16. No. 7. Pp. 2442–2451.

22. **Goldman N., Fellers R.S., Leforestier C., Saykally R.J.** Water dimers in the atmosphere: equilibrium constant for water dimerization from the VRT (ASP-W) potential surface // J. Phys. Chem. A. 2001. Vol. 105. No. 3. Pp. 515–519.

23. **Wolk J., Strey R.** Homogeneous nucleation of H₂O and D₂O in comparison: the isotope effect // J. Phys. Chem. B. 2001. Vol. 105. No. 47. Pp. 11683–11701.

24. **Xu X., Goddard W.** Bonding properties of water dimer: a comparative study of density functional theories // J. Phys. Chem. A. 2004. Vol. 108. No. 12. Pp. 2305–2313.

25. **Bykov N.Yu., Gorbachev Yu.E., Zakharov V.V.** Simulation of small cluster formation in water vapor plumes // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1786. No. 1. Pp. 050001-1–050001-8.

26. **Черный Г.Г.** Газовая динамика. М.: Наука, 1988. 424 с.

27. **Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А.** Прикладная динамика разреженного газа. М.: Машиностроение, 1977. 184 с.

Статья поступила в редакцию 30.11.2017, принята к публикации 08.02.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

БЫКОВ Николай Юрьевич — кандидат физико-математических наук, начальник научно-исследовательского отдела Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nbykov2006@yandex.ru

REFERENCES

- [1] **J.F. Crifo**, Water clusters in the coma of comet Halley and their effect on the gas density, temperature, and velocity, *Icarus*. 84 (2) (1990) 414–446.
- [2] **L.E. Sternin**, *Osnovy gazodinamiki dvukhfaznykh techeniy v soplakh* [Fundamentals of gas dynamics of two-phase flows in the nozzles]. Mashinostroyeniye, Moscow, 1974.
- [3] **Yu.V. Platov, B.P. Filippov, A.I. Semenov**, Condensation of combustion products in the exhaust plumes of rocket engines in the upper atmosphere, *Geomagnetism and Aeronomy*. 51 (4) (2011) 550–556.
- [4] **G.A. Bird**, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Clarenton Press, Oxford, 1994.
- [5] **B. Briehe, H.M. Urbassek**, Monte Carlo simulation of growth and decay processes in a cluster aggregation source, *J. Vac. Sci. Technol. A*. 17 (1) (1999) 256–265.
- [6] **M.I. Zeifman, B.J. Garrison, L.V. Zhigilei**, Combined molecular dynamics direct simulation Monte Carlo computation study of laser ablation plume evolution, *J. Appl. Phys.* 92 (4) (2002) 2181–2193.
- [7] **N.Yu. Bykov, G.A. Lukyanov**, Direct simulation Monte Carlo of pulsed laser ablation of metals with clusterization processes in vapor, *Thermophysics and Aeromechanics*. 13 (4) (2006) 569–582.
- [8] **T.E. Itina, K. Gouriet, L.V. Zhigilei, et al.**, Mechanisms of small clusters production by short and ultra-short pulse laser ablation, *Appl. Surf. Sci.* 253 (19) (2007) 7656–7661.
- [9] **Z. Li, J. Zhong, D.A. Levin, B.J. Garrison**, Development of homogeneous water condensation models using molecular dynamics, *AIAA Journal*. 47 (5) (2009) 1241–1251.
- [10] **R. Jansen, I. Wysong, S. Gimelshein, et al.**, Nonequilibrium numerical model of homogeneous condensation in argon and water vapor expansions, *J. Chem. Phys.* 132 (24) (2010) 244105.
- [11] **N.Yu. Bykov, Yu.E. Gorbachev**, Mathematical models of water nucleation process for the Direct Simulation Monte Carlo method, *Applied Mathematics and Computation*. 296 (1 March) (2017) 215–232.
- [12] **J. Zhong, M.I. Zeifman, S.F. Gimelshein, D.A. Levin**, Modeling of homogeneous condensation in supersonic plumes with the DSMC method, *AIAA Paper* (2004), 42nd Aerospace Sciences Meeting, Jan. 5 – 8, Reno, Nevada, 2004-0166.
- [13] **J. Zhong, M.I. Zeifman, S.F. Gimelshein, D.A. Levin**, Direct simulation Monte Carlo modeling of homogeneous condensation in supersonic plumes, *AIAA Journal*. 43 (8) (2005) 1784–1796.
- [14] **N.Y. Bykov, Y.E. Gorbachev**, Direct statistical simulation of the processes of clusters formation in the gas phase: classical approach with cluster size correction, *High Temperature*. 53 (2) (2015) 291–300.
- [15] **D.I. Zhukhovitskii**, Size-corrected theory of homogeneous nucleation, *J. Chem. Phys.* 101 (6) (1994) 5076–5080.
- [16] **N.Y. Bykov, Y.E. Gorbachev**, Comparative analysis of condensation models within DSMC, *AIP Conference Proceedings*. 1628 (1) (2014) 139–147.
- [17] **N.M. Bulgakova, M.Yu. Plotnikov, A.K. Rebrov**, Modeling steady-state gas expansion from a spherical surface into a vacuum, *Fluid Dynamics*. 32 (6) (1997) 137–143.
- [18] **G.A. Lukyanov, Gr.O. Khanlarov**, Stationary water vapor expansion from a spherical surface into vacuum, *Thermophysics and Aeromechanics*. 7 (4) (2000) 511–521.
- [19] **N.Yu. Bykov**, Modelling of condensation at spherical expansion of water vapor into vacuum, *Thermophysics and Aeromechanics*. 2009. 16 (2) (2009) 189–199.
- [20] **G.A. Bird**, Simulation of multi-dimensional and chemically reacting flows, In: *Rarefied Gas Dynamics*, ed. by R. Campargue, Commissariat a Lenergie Atomique, Paris, 1 (1979) 365–388.
- [21] **S.F. Gimelshein, N.E. Gimelshein, D.A. Levin, et al.**, On the use of chemical reaction rates with discrete internal energies in the direct simulation Monte Carlo method, *Physics of Fluids*. 16 (7) (2004) 2442–2451.
- [22] **N. Goldman, R.S. Fellers, C. Leforestier, R.J. Saykally**, Water dimers in the atmosphere: Equilibrium constant for water dimerization from the VRT (ASP-W) potential surface, *J. Phys. Chem. A*. 105 (3) (2001) 515–519.
- [23] **J. Wolk, R. Strey**, Homogeneous nucleation of H₂O and D₂O in comparison: the isotope effect, *J. Phys. Chem. B*. 105 (47) (2005) 11683–11701.
- [24] **X. Xu, W. Goddard**, Bonding properties of water dimer: a comparative study of density functional theories, *J. Phys. Chem. A*. 108 (12) (2004) 2305–2313.
- [25] **N.Y. Bykov, Y.E. Gorbachev, V.V. Zakharov**, Simulation of small cluster formation in water vapor plumes, *AIP Conference Proceedings*, 1786 (1) (2016) 050001-1–050001-8.
- [26] **G.G. Cherniy**, *Gazovaya dinamika* [Gas dynamics], Nauka, Moscow, 1988.
- [27] **Yu.A. Koshmarov, Yu.A. Ryzhov**, *Prikladnaya dinamika razrezhennogo gaza* [Applied rarefied gas dynamics], Mashinostroyeniye, Moscow, 1977.

Received 30.11.2017, accepted 08.02.2018.



THE AUTHOR

БЫКОВ Nikolay Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

nbykov2006@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.111110

УДК 537.874.4 + 538.971 + 538.975

**ПОРИСТОСТЬ И МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ
СЛОЕВ СЕЛЕНИДА СВИНЦА – СЕЛЕНИДА ОЛОВА
НА КРЕМНИЕВЫХ ПОДЛОЖКАХ ПО ДАННЫМ
РЕНТГЕНО-ДИФРАКЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ****А.И. Мамонтов¹, А.П. Петраков², С.П. Зимин³**¹Вятский государственный университет, г. Киров, Российская Федерация;²Сыктывкарский государственный университет имени Питирима Сорокина,
г. Сыктывкар, Российская Федерация;³Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,
г. Ярославль, Российская Федерация

В работе методом рентгеновской рефлектометрии проведено исследование величины пористости и морфологии поверхности пленок $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se$ на кремниевых подложках, подвергнутых анодному электрохимическому травлению в электролите Томпкинса – Джонсона при плотности тока 1 мА/см^2 . Для уменьшения расхождения по параметру решетки растущей пленки применялись буферные слои CaF_2 (толщина около 2 нм) и $PbSe$ (около 400 нм). Определена усредненная толщина приповерхностного слоя переосажденного селена (45 нм), получено качественное соответствие между результатами рентгеновских и электронно-микроскопических исследований. Методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии установлено, что при электрохимическом травлении формируется макропористая структура с поперечными и продольными проекциями пор размерами 47 и 82 нм соответственно. Определен угол наклона пор к нормали поверхности; он составил 34,5 град. Показаны возможности применения рентгеновских методов высокого разрешения для неразрушающего исследования структуры пористых материалов.

Ключевые слова: анодирование; пористость; рефлектометрия; электрохимическое травление; селенид свинца – селенид олова

Ссылка при цитировании: Мамонтов А.И., Петраков А.П., Зимин С.П. Пористость и морфология поверхности слоев селенида свинца – селенида олова на кремниевых подложках по данным рентгено-дифракционных исследований // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 102 – 111. DOI: 10.18721/JPM.111110

**POROSITY AND SURFACE MORPHOLOGY
OF LEAD SELENIDE – TIN SELENIDE LAYERS ON SILICON SUBSTRATES:
X-RAY DIFFRACTION STUDIES****A.I. Mamontov¹, A.P. Petrakov², S.P. Zimin³**¹Vyatka State Humanities University, Kirov, Russian Federation;²Syktvkar State University Named after Pitirim Sorokin, Syktvkar, Russian Federation;³P.G. Demidov Yaroslavl State University, Yaroslavl, Russian Federation



In the paper, the surface porosity and morphology of $\text{Pb}_{0.97}\text{Sn}_{0.03}\text{Se}$ films on silicon substrates subjected to anodic electrochemical etching in the Tompkins-Johnson's electrolyte at a current density of 1 mA/cm^2 have been studied using X-ray reflectometry. To reduce the difference in lattice parameters of a growing film, buffer CaF_2 layer (about 2 nm thick) and buffer PbSe one (about 400 nm thick) were used. The averaged thickness of re-precipitated near-surface selenium layer was determined to be 45 nm. The X-ray experimental results showed qualitative agreement with electron-microscopical data. It was established by high-resolution X-ray diffraction methods that macroporous structure with transverse and longitudinal porous projections of sizes 47 and 82 nm (relatively) was forming in electrochemical etching. The angle of porous tilt with the surface normal was found to be 34.5 degrees. The applicability of high-resolution X-ray methods to nondestructive investigation of porous structure was shown.

Key words: anodizing; porosity; total external reflection method; electrochemical etching; lead-tin selenide

Citation: A.I. Mamontov, A.P. Petrakov, S.P. Zimin, Porosity and surface morphology of lead selenide – tin selenide layers on silicon substrates: X-ray diffraction studies, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 102 – 111. DOI: 10.18721/JPM.11110

Введение

Пористые полупроводниковые материалы привлекают в настоящее время большое внимание исследователей своими уникальными свойствами и новыми потенциальными возможностями. Процессы порообразования активно изучаются в элементарных полупроводниках (кремнии и германии), в бинарных и тройных материалах A^3B^5 , A^2B^6 [1 – 3 и др.]. Халькогениды свинца (PbTe , PbSe , PbS и твердые растворы на их основе), относящиеся к узкозонным полупроводникам A^4B^6 , традиционно широко применяются в термоэлектрических устройствах, приборах оптоэлектроники ИК-диапазона, солнечных элементах и т. п. Процессы порообразования в этих материалах способны привести к эффективной модификации структурных, электрических и оптических свойств [4 – 7 и др.]. При этом чрезвычайно важной становится информация о морфологии поверхности, структуре пористых объектов, размерах пор и величине пористости. Так, в работе [7] было показано, что процессы порообразования в пленках селенида свинца – селенида олова сопровождаются значительным переосаждением селена на стенки пор и на поверхность.

Цель данной работы – определение параметров пор и поверхности пористых пленок $\text{Pb}_{0.97}\text{Sn}_{0.03}\text{Se}$ на кремниевых подложках с помощью высокоразрешающих рентгеновских методов. Представленные резуль-

таты продолжают исследования, опубликованные в работе [7].

Методика эксперимента

Пленочные образцы $\text{Pb}_{0.97}\text{Sn}_{0.03}\text{Se}/\text{PbSe}/\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ общей толщиной 4,5 мкм выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на монокристаллической подложке $\text{Si}(111)$. Размер блоков мозаики подложки, определенный методом рентгеновской дифракции высокого разрешения [8], составил примерно 30 мкм. Тонкие буферные слои CaF_2 (толщина около 2 нм) и PbSe (около 400 нм) применялись для уменьшения расхождения по параметру решетки растущей пленки ($a_1 = 0,615 \text{ нм}$) и подложки ($a_2 = 0,543 \text{ нм}$), а также для уменьшения механических напряжений в слое тройного твердого раствора.

Порообразование в приповерхностном слое селенида свинца – селенида олова проводилось в электрохимической ячейке вертикального типа с верхним катодом из платины при плотности тока 1 mA/cm^2 в течение 10 мин. Травление происходило в травителе Томпкинса – Джонсона (Tompkins and Johnson solution): 40 мл глицерина, 10 мл HNO_3 , 10 мл ледяной уксусной кислоты. Технология и основные свойства пористой структуры полученных образцов описаны в работе [7].

Исследования методами рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения и

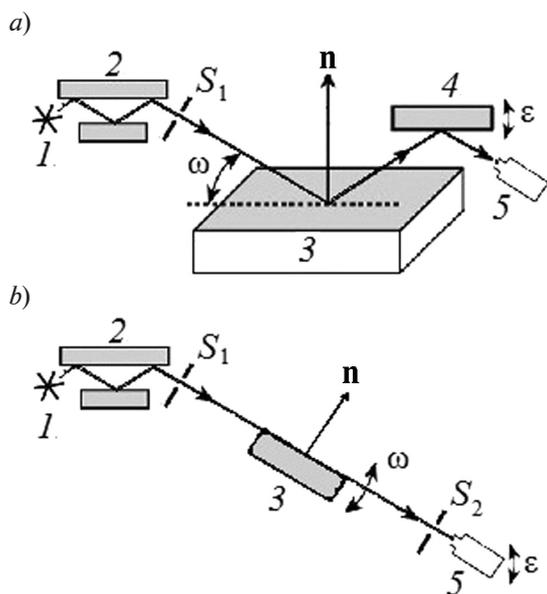


Рис. 1. Трехкристальная дифракционная (а) и рефлектометрическая (б) схемы рентгеновских методов съемки:

- 1 – источник рентгеновского излучения, 2 – монохроматор, 3 – образец, 4 – анализатор, 5 – детектор; \mathbf{n} – нормали к поверхности; S_1, S_2 – щели; обозначения углов поясняются в тексте

рентгеновской рефлектометрии проводились на аппарате ДРОН-УМ1. Излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ($\lambda K_{\alpha 1} = 1,5405 \text{ \AA}$, $\lambda K_{\alpha 2} = 1,5443 \text{ \AA}$) было сформировано щелевым монохроматором из монокристаллического кремния с трехкратным отражением (111) и выходными щелями коллиматора шириной 2,0 и 0,1 мм в вертикальном и горизонтальном направлениях, соответственно.

Схема дифракции собрана на гониометре, позволяющем регистрировать угловое отклонение в трехкристальной геометрии с точностью до 0,1 угл. сек. (рис. 1, а). Между исследуемым образцом и детектором устанавливался плоский кристалл-анализатор Si(111).

Данные о свойствах образцов и их поверхности находят из зависимости детектируемой интенсивности от углов поворота образца и анализатора. Метод позволяет определять межплоскостные расстояния эпитаксиальных структур, а также параметры пор в пористых материалах. Рассеяние

от шероховатой поверхности или рассеяние, вызванное дефектами, можно отделить от рассеяния совершенным кристаллом.

В работе также применялся метод рентгеновской рефлектометрии, основанный на измерении отражательной способности рентгеновского излучения в угловой области полного внешнего отражения (ПВО). При съемке методом рефлектометрии перед детектором устанавливалась щель шириной $S_2 = 0,25 \text{ мм}$ (рис. 1, б).

Обработка и обсуждение результатов

Структурные особенности пористых слоев $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$ исследовались методами трехкристальной рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения (ТРД). Для этого были построены контуры равной интенсивности диффузного рассеяния на рентгенограммах, снятых в режиме сканирования анализатором при различных положениях кристалла-образца [9]. Контуры равной интенсивности (рис. 2) строились в обратном пространстве по формулам:

$$q_z = (2\pi\varepsilon \cdot \cos \theta_B) / \lambda, \quad (1)$$

$$q_x = [2\pi(2\omega - \varepsilon) \sin \theta_B] / \lambda, \quad (2)$$

где ε, ω – углы отклонения соответственно анализатора и образца от брэгговского положения; θ_B – угол Брэгга; λ – длина волны рентгеновского излучения.

Разрешение системы было следующим: $\Delta q_z = 0,1 \text{ (мкм)}^{-1}$, $\Delta q_x = 0,2 \text{ (мкм)}^{-1}$.

В процессе выращивания слоев селенида свинца – селенида олова методом молекулярно-лучевой эпитаксии обычно получают достаточно совершенные кристаллы. Однако из-за несоответствия параметров решетки подложки, а также буферного слоя, параметрам исследуемой структуры, из-за разницы в температурных коэффициентах линейного расширения материалов многослойной системы, в эпитаксиальной пленке образуются пронизывающие дислокации и точечные дефекты. К тому же изначально у подложки было небольшое отклонение решетки от поверхности, составляющее примерно 1 – 2 град. Это приводило к наличию небольшого наклона решетки и у выращенной пленки.

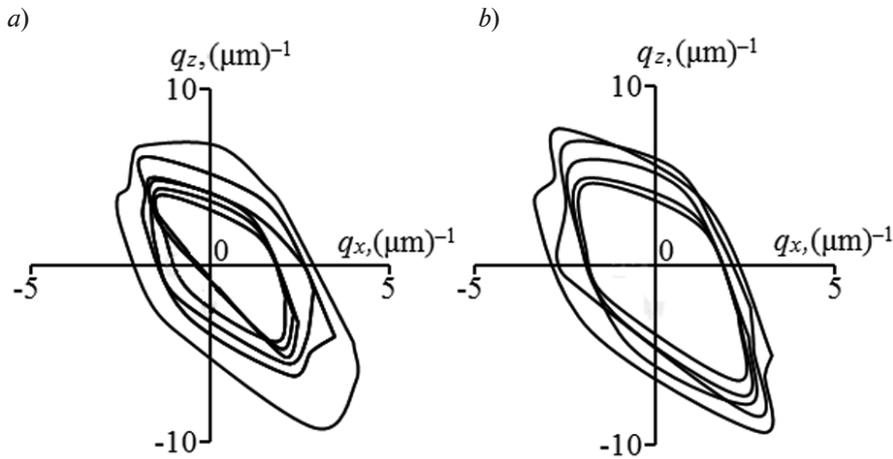


Рис. 2. Контуры равной интенсивности вокруг узла обратной решетки (111) для структуры $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se/PbSe/CaF_2/Si(111)$, полученные методом ТРД для исходной (a) и пористой (b) поверхностей

На рис. 3 приведена зависимость интенсивности I_s диффузного рассеяния на кривых ТРД от угла ω поворота образца (в двойном логарифмическом масштабе). Видно, что интенсивность спадает по закону ω^{-b} . Параметр b находили путем определения тангенса угла наклона зависимости

$$\ln I_s = f(\ln \omega);$$

он получился равным 1,8.

Такое значение найденного параметра свидетельствует о том, что рентгеновское излучение рассеивается преимущественно на дислокациях [8]. Физическая природа и роль дислокаций в подобных системах (пленки халькогенидов свинца на кремниевой подложке) подробно описаны в работе [10].

Контуры вокруг узла обратной решетки (111) в виде наклоненного овала с вдавленными краями (см. рис. 2) соответствуют диффузному рассеянию от мелких дефектов тригональной симметрии [11]. Форма контуров после анодирования становится более характерной для диффузного рассеяния на мелких дефектах. Основными дефектами, которые образуются при анодировании, обычно являются поры. Отсюда логично предположить, что определяющее влияние на дифракционную картину от пористых пленок $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se$ оказывает рассеяние рентгеновского излучения порами.

Электронно-микроскопические изображения сколов пористой пленки приведены на рис. 4. Поверхности пленок характеризуются достаточно однородной структурой (область 1). После процесса электрохимического травления образовывался пористый слой толщиной около 700 нм (область 2), и поверхность образца стала обладать сложной морфологией. Обращает на себя внимание, что приповерхностный слой толщиной около 50 нм (область 1

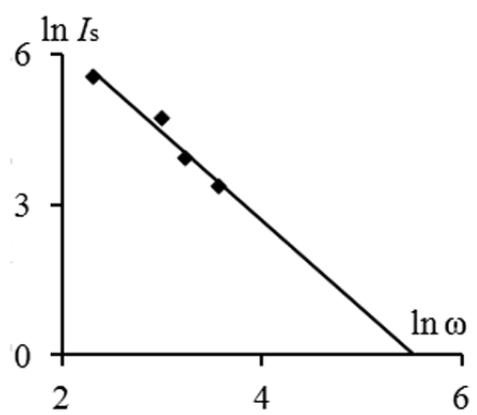


Рис. 3. Линейная анаморфоза угловой зависимости интенсивности диффузного пика рассеяния для исходной системы $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se/PbSe/CaF_2/Si(111)$; зависимость получена методом ТРД; ω – угол поворота образца (см. рис. 1, a)

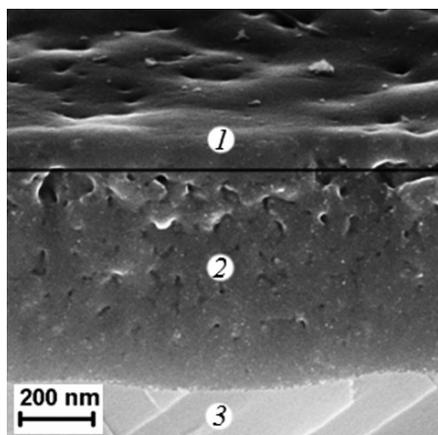


Рис. 4. Микрофотографии сколов пористой пленки селенида свинца – селенида олова; представлены области переосажденного селена (1), пористой структуры (2) и неизменная область (3)

скола) не имеет явно выраженных пор и является, по всей видимости, слоем осаждения продуктов электрохимических реакций, основу которых составляет селен. Это подтверждено обратным рассеянием электронов при напряжении 10 кВ [7]. Оценка величины геометрической пористости (отношения площади пор к общей площади) по серии изображений сколов показала, что пористость неоднородна по толщине и изменяется от 37 % в верхней части до 18 %

в нижней части исследуемого пористого слоя $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se$.

При электрохимическом анодировании в кристаллах $Pb_{0,97}Sn_{0,03}Se$ образуются поры в форме параллелепипедов с размытыми границами [7]. Средние размеры пор вдоль поверхности (l_x) и перпендикулярно ей (l_z) можно оценить по полуширине диффузных пиков рассеяния, полученных путем вращения кристалла-образца при фиксированном угловом положении кристалла-анализатора (ω -сканирование) и ($\theta/2\theta$)-сканировании (рис. 5):

$$l_x \approx \lambda / (2\Delta\theta \cdot \sin\theta_B), \quad (3)$$

$$l_z \approx \lambda / (2\Delta\theta_z \cdot \cos\theta_B), \quad (4)$$

где $\Delta\theta$, $\Delta\theta_z$ – величины ширины диффузного пика рассеяния на кривых ТРД, снятых в режимах ω - и ($\theta/2\theta$)-сканирования, соответственно (во втором из этих режимов шаг вращения анализатора в два раза больше, чем у образца).

На самом деле поры не представляют собой вертикальные пустоты в виде параллелепипедов, а имеют изломы и наклонены под углом к поверхности пленки [7], что приводит к уменьшению их средних размеров по глубине. Оценить средний угол ξ наклона пор к нормали поверхности образца можно из углового положения диффузного пика при анализе дифрактограмм,

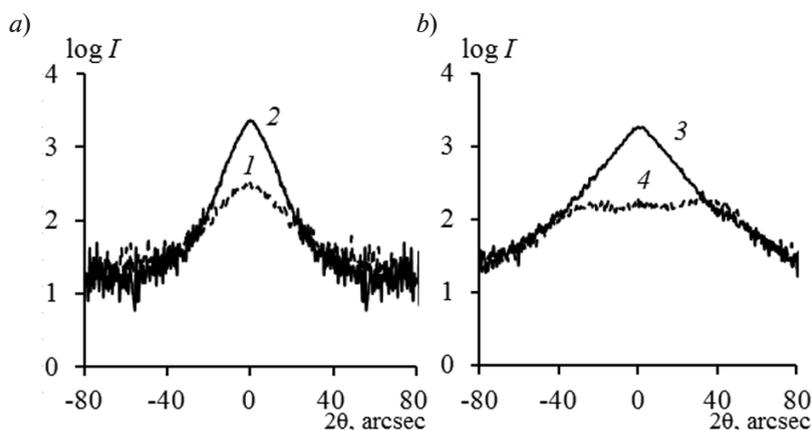


Рис. 5. Интенсивности диффузного рассеяния (кривые ТРД), зарегистрированные для пористого селенида свинца – селенида олова в режимах ($\theta/2\theta$)- (a) и ω - (b) сканирования; кривые 1, 2 получены для исходной и пористой поверхностей, соответственно; кривые 3, 4 – при значениях угла $\varepsilon = 0$ и -30° , соответственно



снятых при вращении кристалла-образца при фиксированном угловом положении кристалла-анализатора (см. рис. 5):

$$\operatorname{tg} \xi = q_{x0} / q_{z0}, \quad (5)$$

где q_{x0} , q_{z0} — координаты диффузного пика на сечениях ТРД.

Значение угла наклона ξ позволяет оценить средние величины поперечного (d) и продольного (l_l) размеров пор (перпендикулярно и вдоль поверхностной нормали) [8]:

$$d \approx l_x \sin \xi, \quad (6)$$

$$l_l \approx l_z / \sin \xi, \quad (7)$$

где l_x , l_z — средние размеры пор вдоль поверхности и по глубине слоя.

При плотности тока 1 мА/см^2 и времени анодирования 10 мин поперечные и продольные проекции пор имели размеры 47 и 82 нм соответственно. Средний угол наклона пор от нормали к поверхности составил 34,5 град. Это значение близко к значению угла в 35 град, определенному для распространения пор в пленках теллурида свинца [5] и соответствующему формированию пор в кристаллографическом направлении [110]. Обращает на себя внимание тот факт, что продольные размеры пор оказались меньше общей толщины пористого слоя, что, по всей видимости, свидетельствует о распаде

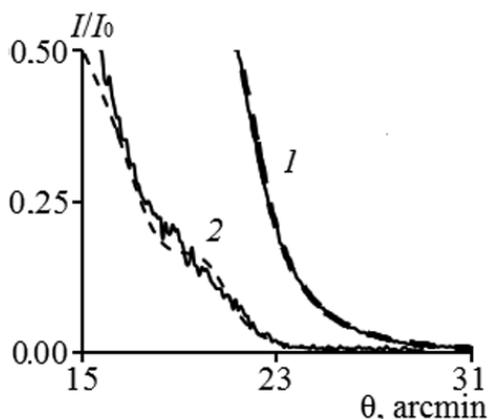


Рис. 6. Экспериментальные (сплошные линии) и теоретические (пунктир) кривые, полученные методом рентгеновской рефлектометрии для исходной (1) и пористой (2) поверхностей; $\chi^2 = 0,32$ (1) и 2,34 (2)

сквозных пор на несколько участков.

На рис. 6 приведены нормированные экспериментальные интегральные кривые рентгеновской рефлектометрии до и после электролитического травления. Глубина проникновения рентгеновских лучей в образец при этом минимальна и выражается длиной экстинкции, определяемой через коэффициент поляризации χ в пределах брэгговского отражения. Для монокристалла селенида свинца длина экстинкции составляет около 380 нм.

Величина критического угла на графиках, полученных методом рефлектометрии, позволяет для однородных систем рассчитать степень пористости P , т. е. отношение объема пор к объему образца в процентах [12, 13]:

$$P = 1 - (\theta_{ca} / \theta_{ci})^2, \quad (8)$$

где θ_{ci} , θ_{ca} — критические углы на рефлектограммах до и после анодирования, соответственно.

Основными факторами, влияющими на изменение формы кривой рефлектограммы, являются микрогеометрия поверхности и наличие неоднородностей в приповерхностной области образца. Критический угол θ_c определяется по угловому положению точки с интенсивностью, равной половине высоты в области уменьшения интенсивности. Значительное снижение величины θ_c после анодирования объясняется ростом степени поглощения рентгеновского излучения в результате появления пор. Степень пористости составила 44 %.

Следует отметить, что длина экстинкции почти в два раза меньше толщины анодированной области (700 нм по снимку скола, см. рис. 4) и степень пористости вычисляется лишь для верхней области пористого образца. В анализируемом случае на поверхности пористого слоя $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$ дополнительно находится пористый слой селена.

Важно учесть, что критические углы, через которые определяется пористость, зависят от коэффициента поляризации вещества, а часть приповерхностного слоя толщиной около 50 нм (1/6 — 1/7 часть исследуемой поверхности), как показано

выше, составляют осажденные продукты реакций. Для сравнения, критический угол у идеального монокристалла селена ($0,281^\circ$) меньше, чем у кристалла селенида свинца ($0,367^\circ$). Если учесть, что толщина слоя селена составляет 14 – 17 % от исследуемой области, то очевидно, что пренебрегать влиянием этого слоя на кривые рентгеновской рефлектометрии нельзя. В результате значения величины пористости в селениде свинца-олова, полученные по формуле (8), оказались завышенными, по сравнению с величиной геометрической пористости в верхней области пористого слоя. Поэтому следующим этапом работы был анализ данных рентгеновской рефлектометрии для пористой системы в рамках двухслойной модели.

Для определения структурных параметров исследуемой поверхности по данным рентгеновской рефлектометрии обычно строят теоретический график (см. рис. 6, пунктирные кривые), добиваясь высокой степени сходимости с экспериментальной кривой рефлектометрии [14, 15]. При построении теоретической кривой применяется схема анализа с использованием рекуррентных соотношений Паррата для расчета амплитуды R_n зеркального отражения рентгеновского излучения от n слоев заданной структуры [15]:

$$R_n = \frac{r_n + R_{n-1} \exp(2\pi D_n k_n / \lambda)}{1 + r_n R_{n-1} \exp(2\pi D_n k_n / \lambda)}, \quad (9)$$

$$k_n = \sin^2 \theta + \chi_n, \quad (10)$$

где θ – угол падения рентгеновского излучения; χ_n – поляризуемость материала n -го слоя (в первом приближении она пропорциональна электронной плотности в этом материале); D_n – толщина слоя.

Амплитуды отражения r_n от границы каждого отдельного слоя определяются коэффициентами Френеля k_n :

$$r_n = \frac{k_{n+1} - k_n}{k_{n+1} + k_n} \exp \left[-0,5 \left(\frac{2\pi}{\lambda} k_n \sigma_n \right)^2 \right], \quad (11)$$

где σ_n – шероховатость слоя.

При моделировании теоретической кривой рефлектометрии подбирались толщина слоев D_n и их шероховатость σ_n . Параметры поверхности $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$, полученные методом минимизации функционала χ^2 , приведены в таблице. Для исходных пленок мы имеем достаточно ровную поверхность, для которой характерны треугольные нанотеррасы с типичной высотой в несколько нанометров [5]. Рассчитанная плотность ρ для исходной поверхности в модели оказалась чуть меньше плотности монокристалла селенида свинца. После электрохимического травления плотность селенида свинца-олова снизилась на 32 %, по сравнению с табличными значениями для селенида свинца ($8,3 \text{ г/см}^3$). Значение величины пористости в 32 %, найденное по изменению плотности, хорошо соответствует усредненной геометрической пористости в верхней

Таблица

Результаты моделирования слоев $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$

| Поверхность (сходимость χ^2) | $D_n, \text{ \AA}$ | | $\sigma_n, \text{ \AA}$ | | $\rho_n, \text{ г/см}^3$ | |
|---------------------------------------|--------------------|---------|-------------------------|---------|--------------------------|---------|
| | $n = 1$ | $n = 2$ | $n = 1$ | $n = 2$ | $n = 1$ | $n = 2$ |
| Исходная (0,32) | – | – | 43 | – | 7,8 | – |
| Пористая (2,34) | 450 | – | 350 | 50 | 4,4 | 5,7 |

Обозначения: D_n , σ_n , ρ_n – толщина, шероховатость и плотность n -го слоя.

Примечания: 1. Пористая поверхность состоит из приповерхностного и собственно пористого слоев.

2. При моделировании рассеяние рентгеновского излучения подложкой и исходным непористым слоем не учитывалось.



половине пористого слоя $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$. Для анодированных пленок выявлен тонкий поверхностный слой предположительно селена (табличные значения плотности селена в различных модификациях находятся в интервале $4,3 - 4,8 \text{ г/см}^3$) толщиной около 45 нм, что соответствует оценочным данным электронной микроскопии. Значение σ_2 для второго слоя представляет собой шероховатость границ между слоями.

Заключение

Методы рефлектометрии и рентгеновской дифракции высокого разрешения оказались эффективными инструментами для определения величины пористости и параметров пор пленок $\text{Pb}_{0,97}\text{Sn}_{0,03}\text{Se}$. Установлено, что при электрохимическом порообразовании в электролите Томпкинса – Джонсона при плотности тока 1 мА/см^2 формируется макропористая структура с поперечными проекциями пор размером 47 нм и продольными в 82 нм. Найдена усредненная толщина припо-

верхностного слоя селена – 45 нм, оказывающая значительное влияние на величину пористости, определяемую методом рефлектометрии. Получено качественное соответствие между результатами рентгеновских и электронно-микроскопических исследований. Показаны возможности применения рентгеновских методов высокого разрешения для неразрушающего исследования структуры пористых материалов.

Благодарности

Авторы признательны Х. Зоггу (Швейцарская высшая техническая школа, г. Цюрих) за предоставленные для исследований пленки $\text{PbSnSe/PbSe/CaF}_2/\text{Si}(111)$, а также кандидату физико-математических наук Э.Ю. Бучину (заместитель директора Ярославского филиала ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН) за помощь в проведении анодной обработки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 13-02-00381).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Properties of porous silicon. Ed. by L. Canham. Malvern: DERA, 1997. 400 p.
2. Cojocar A., Leisner M., Carstensen J., Föll H. Comparison of currentline pore growth in *n*-type InP and in *n*-type Si // Phys. Stat. Sol. (c). 2011. Vol. 8. No. 6. P. 1779–1782.
3. Tiginyanu I.M., Monaico E., Ursaki V.V., Tezlevan V.E., Boyd R.W. Fabrication and photoluminescence properties of porous CdSe // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 86. No. 6. P. 063115.
4. Zimin S.P., Bogoyavlenskaya E.A., Buchin E.Yu., Petrakov A.P., Zogg H., Zimin D. Formation of porous nanostructured lead telluride films by anodic electrochemical etching method // Semicond. Sci. Technol. 2009. Vol. 24. No. 10. P. 105008(1)–105008(6).
5. Zimin S.P., Vasin V.M., Goralchev E.S., Naumov V.V., Petrakov A.P., Shilov S.V. Fabrication and study of porous PbTe layers on silicon substrates // Phys. Stat. Sol. (c). 2011. Vol. 8. No. 6. Pp. 1801–1804.
6. Zimin S.P., Vasin V.M., Goralchev E.S., Buchin E.Yu., Naumov V.V. Investigations of PbSe porous layers by scanning electron microscopy // Phys. Stat. Sol. (c). 2011. Vol. 8. No. 6. Pp. 1918–1922.
7. Zimin S.P., Goralchev E.S., Skok F.O., Naumov V.V. Investigations of the pore formation in the lead selenide films using glacial acetic acid- and nitric acid-based electrolyte // Nanoscale Research Letters. 2012. Vol. 7. No. 1. P. 338.
8. Бушуев В.А., Петраков А.П. Исследование влияния лазерного отжига на структуру приповерхностных слоев ионно-имплантированного кремния методом рентгеновской дифрактометрии // ФТТ. 1993. Т. 35. № 2. С. 355–364.
9. Ломов А.А., Прохоров Д.Ю., Имамов Р.М., Нохавица Д., Гладков П. Структурная характеристика пористых слоев InP(001) методом трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 5. С. 49–55.
10. Zogg H., Maissen C., Blunier S., Teodoropol S., Overney R.M., Richmond T., Tamm J.W. Thermal-mismatch strain relaxation mechanisms in heteroepitaxial lead chalcogenide layers on Si substrates // Semicond. Sci. and Technol. 1993. Vol. 8. No. 1S. Pp. S337–S341.
11. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 407 с.
12. Петраков А.П. Исследование приповерхностных слоев веществ рентгеновскими методами дифракции, рефлектометрии и фазового контраста. Сыктывкар: Изд-во Сыктывкарского ун-та, 2007. 148 с.
13. Петраков А.П., Садовников Д.В. Рентге-

новская рефлектометрия поверхностей монокристаллов, нанокompозитных и окисных пленок // Вестник Коми НЦ УрО РАН. 2006. № 9. С. 7–9.

14. **Якунин С.Н., Пашаев Э.М., Зайцев А.А., Субботин И.А., Рзаев М.А., Имамов Р.М.** Структура сверхрешеток Si/Si(1-x)Ge_x по данным

рентгеновских методов диагностики // Микроэлектроника. 2005. Т. 34. № 4. С. 291–301.

15. **Чуев М.А., Субботин И.А., Пашаев Э.М., Квардаков В.В., Аронзон Б.А.** Фазовые соотношения в анализе кривых рентгеновской рефлектометрии от сверхрешеток // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 85, № 1. С. 21–26.

Статья поступила в редакцию 01.11.2017, принята к публикации 21.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАМОНТОВ Александр Иванович – старший преподаватель кафедры физики и методики обучения физике Вятского государственного университета, г. Киров, Российская Федерация.

610002, Российская Федерация, Приволжский федеральный округ, Кировская область, г. Киров, Красноармейская ул., 26
snowchek@mail.ru

ПЕТРАКОВ Анатолий Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой инженерной физики и техноферной безопасности Сыктывкарского государственного университета имени Питирима Сорокина, г. Сыктывкар, Республика Коми, Российская Федерация.

167001, Российская Федерация, Республика Коми, г. Сыктывкар, Октябрьский пр., 55
petrakov@syktsu.ru

ЗИМИН Сергей Павлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры микроэлектроники и общей физики Ярославского государственного университета им. П.Г. Демидова, г. Ярославль, Российская Федерация.

150000, Российская Федерация, г. Ярославль, Советская ул., 14
zimin@uniyar.ac.ru

REFERENCES

- [1] Properties of porous silicon, Ed. by L. Canham, Malvern, DERA, 1997.
- [2] **A. Cojocaru, M. Leisner, J. Carstensen, H. Föll,** Comparison of currentline pore growth in *n*-type InP and in *n*-type Si, Phys. Stat. Sol. (c). 8 (6) (2011) 1779–1782.
- [3] **I.M. Tiginyanu, E. Monaico, V.V. Ursaki, et al.,** Fabrication and photoluminescence properties of porous CdSe, Appl. Phys. Lett. 86 (6) (2005) 063115.
- [4] **S.P. Zimin, E.A. Bogoyavlenskaya, E.Yu. Buchin, et al.,** Formation of porous nanostructured lead telluride films by anodic electrochemical etching method, Semicond. Sci. Technol. 24 (10) (2009) 105008(1)–105008(6).
- [5] **S.P. Zimin, V.M. Vasin, E.S. Gorlachev, et al.,** Fabrication and study of porous PbTe layers on silicon substrates, Phys. Stat. Sol. (c). 8 (6) (2011) 1801–1804.
- [6] **S.P. Zimin, V.M. Vasin, E.S. Gorlachev, et al.,** Investigations of PbSe porous layers by scanning electron microscopy, Phys. Stat. Sol. (c). 8 (6) (2011) 1918–1922.
- [7] **S.P. Zimin, E.S. Gorlachev, F.O. Skok, V.V. Naumov,** Investigations of the pore formation in the lead selenide films using glacial acetic acid- and nitric acid-based electrolyte, Nanoscale Research Letters. 7 (1) (2012) 338.
- [8] **V.A. Bushuyev, A.P. Petrakov,** Influence of laser annealing on the structure of the surface layers of ion-implanted silicon by X-ray diffractometry, Physics of the Solid State. 35 (2) (1993) 355–364.
- [9] **A.A. Lomov, D.Yu. Prokhorov, R.M. Imamov, et al.,** Characterization of porous InP (001) layers by triple-crystal X-ray diffractometry, Crystallography Reports. 51 (5) (2006) 754–760.
- [10] **H. Zogg, C. Maissen, S. Blunier, et al.,** Thermal-mismatch strain relaxation mechanisms in heteroepitaxial lead chalcogenide layers on Si substrates, Semicond. Sci. and Technol. 8(1S) (1993) S337–S341.
- [11] **M.A. Krivoglaz,** Difraktsiya rentgenovskikh luchey i neytronov v neidealnykh kristallakh [Diffraction of X-rays and neutrons in imperfect crystals], Kiev, Naukova Dumka, 1983.
- [12] **A.P. Petrakov,** Issledovaniye pripoverkhnostnykh slojev veshchestv rentgenovskimi metodami difraktsii, reflektometrii i fazovogo kontrasta [Studies of near-surface substance layers by X-ray diffraction, reflectometry and phase contrast techniques], Syktyvkar, Izd-vo Syktyvkarского un-ta, 2007.



[13] **A.P. Petrakov, D.V. Sadovnikov,** Rentgenovskaya reflektometriya poverkhnostey monokristallov, nanokompozitnykh i okisnykh plenok [X-ray reflectometry of monocrystalline surfaces, nanocomposite and oxide films], Vestnik Komi NTs UrO RAN. (9) (2006) 7–9.

[14] **S.N. Yakunin, E.M. Pashaev, A.A. Zaytsev,**

et al., Si/Si_{1-x}Ge_x superlattice structure from X-ray-scattering data, Russian Microelectronics. 34 (4) (2005) 242–251.

[15] **M.A. Chuev, I.A. Subbotin, E.M. Pashaev, et al.,** Phase relations in analysis of glancing incidence X-ray rocking curves from superlattices, JETP Letters. 85 (1) (2007) 17–22.

Received 01.11.2017, accepted 21.11.2017.

THE AUTHORS

MAMONTOV Alexander I.

Vyatka State Humanities University

26 Krasnoarmeyskaya St., Kirov, Kirov region, Volga Federal district, 610002, Russian Federation.
snowchek@mail.ru

PETRAKOV Anatoliy P.

Syktvykar State University Named after Pitirim Sorokin

55 Oktyabrskiy Ave., Syktvykar, Republic of Komi, 167001, Russian Federation.
petrakov@syktsu.ru

ZIMIN Sergey P.

P.G. Demidof Yaroslavl State University

14 Sovetskaya St., Yaroslavl, 150000, Russian Federation.
zimin@uniyar.ac.ru

DOI: 10.18721/JPM.111111

УДК 577.114

МОРФОЛОГИЯ ВЫСУШЕННЫХ НАНОГЕЛЬ-ПЛЕНОК БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ, ПРОПИТАННЫХ РАСТВОРОМ НИТРАТА СЕРЕБРА

**А.К. Хрипунов¹, Т.П. Степанова¹, Н.Н. Сапрыкина¹, Э.П. Астапенко¹,
Д.П. Романов², А.А. Ткаченко³, В.М. Капралова⁴**

¹ Институт высокомолекулярных соединений РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

³ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

Проведено сравнительное исследование высушенных пленок целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus* (ЦГХ) в нативной и дезинтегрированной формах, обработанных водным раствором AgNO_3 . Для исследований использовались методы сканирующей электронной микроскопии (SEM) и рентгеноструктурного анализа. Установлено, что образцы имеют надмолекулярную структуру пленок ЦГХ, известную в настоящее время и представляющую собой пространственную сетку нанолент из ориентационно-упорядоченных макрофибрилл. Последние содержат чередующиеся аморфные и кристаллические области. Изучение указанными методами показало присутствие восстановленного серебра Ag^0 в виде наночастиц размером 10 – 50 нм, располагающихся в вакуолях сетки ЦГХ вблизи элементов морфологической структуры.

Ключевые слова: наногель-пленка, бактериальная целлюлоза, СЭМ, рентгеноструктурный анализ

Ссылка при цитировании: Хрипунов А.К., Степанова Т.П., Сапрыкина Н.Н., Астапенко Э.П., Романов Д.П., Ткаченко А.А., Капралова В.М. Морфология высушенных наногель-пленок бактериальной целлюлозы, пропитанных раствором нитрата серебра // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 112 – 121. DOI: 10.18721/JPM.111111

MORPHOLOGY OF DRIED NANOGEL FILMS OF BACTERIAL CELLULOSE IMPREGNATED WITH THE SILVER NITRATE SOLUTION

**A.K. Khripunov¹, T.P. Stepanova¹, N.N. Saprykina¹, E.P. Astapenko¹,
D.P. Romanov², A.A. Tkachenko³, V.M. Kapralova⁴**

¹ Institute of Macromolecular Compounds of Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation;

² I.V. Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry of Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation;

³ St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russian Federation;

⁴ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation



A comparative study of dried nanogel films of the *Gluconacetobacter xylinus* cellulose (GXC) in native and disintegrated forms treated with AgNO_3 solution has been carried out by means of SEM and XRD. The supermolecular structure of samples studied was shown to be 3D network of nanostrips formed with oriented macrofibrils in which amorphous and crystalline regions alternate. XRD patterns of the GXC dry films, pre-treated with AgNO_3 aqueous solution, demonstrate both residual AgNO_3 and reduced Ag^0 , the latter positioned in longwise direction of morphologic structure elements. The XRD and SEM studies of dried GXC films disintegrated in 1 % AgNO_3 aqueous solution showed the presence of reduced Ag^0 in the form of nanoparticles 10 – 50 nm in diameter located in the free volume of the GXC 3D network nearby structural elements.

Keywords: nanogel film; bacterial cellulose; SEM; XRD

Citation: A.K. Khripunov, T.P. Stepanova, N.N. Saprykina, E.P. Astapenko, D.P. Romanov, A.A. Tkachenko, V.M. Kapralova, Morphology of dried nanogel films of bacterial cellulose impregnated with the silver nitrate solution, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11(1) (2018) 112 – 121. DOI: 10.18721/JPM.11111

Введение

В последнее десятилетие уделяется чрезвычайное внимание исследованиям, посвященным многообразному практическому использованию целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus* (ЦГХ). С целью увеличения выхода и снижения себестоимости этого продукта, в качестве источника углерода изучают чистые сахара и разнообразные сахаросодержащие отходы [1, 2]. Однако среди публикаций по изучению свойств ЦГХ, встречается мало исследований, посвященных морфологии наногель-пленки (НГП) ЦГХ [3]. Между тем, эта пленка имеет несомненные перспективы использования, прежде всего, в медицине (например, в качестве раневого покрытия, насыщаемого разнообразными лекарственными препаратами), где важны исследования вида взаимодействия перспективного антисептика на основе серебра с элементами надмолекулярной структуры пленок ЦГХ [4, 5].

Целью настоящей работы являлось сравнительное изучение морфологии нативной ЦГХ и ее дезинтегрированной формы, предварительно обработанных раствором нитрата серебра.

Методика эксперимента

Подготовка образцов. Биосинтез НГП ЦГХ был описан ранее [1, 4]. После удаления клеток общепринятым методом кипячения в однопроцентном растворе едкого натрия и тщательной промывки дистиллированной водой, полученная НГП ЦГХ по-

сле стерилизации хранилась в герметически закрытых сосудах при постоянной температуре $+5\text{ }^\circ\text{C}$ вплоть до использования.

С целью определения молекулярной массы вискозиметрическим методом проведено растворение сухой пленки ЦГХ в кадоксене (комплекс окиси кадмия в водном растворе этилендиамина) для получения молекулярно-дисперсных растворов [6]. Значение молекулярной массы ЦГХ составило $3,89 \cdot 10^5$ Да.

Пленку целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus*, полученную биосинтезом, отжимали с использованием пресса; при этом удалялось до 95 % воды. Далее пленку помещали в 1%-й раствор нитрата серебра AgNO_3 примерно на 12 ч. Насыщенную этим раствором пленку охватывали тороидальными зажимами и сушили при комнатной температуре.

Дезинтеграцию исходной нативной пленки ЦГХ проводили добавлением некоторого количества дистиллированной воды и 100 мл водного 1%-го раствора AgNO_3 (общий объем раствора составлял 310 мл). Реакционной емкостью служил двухлитровый блендер JTC Omniblend-1 (model TM-767); скорость вращения его ножей была 15000 об/мин. Дезинтеграция проводилась в три этапа, по 5 мин каждый, с перерывами по 30 мин для охлаждения коллоидной суспензии до комнатной температуры. Гель-пленку дезинтегрированной ЦГХ сушили в тех же зажимах, что и нативную. Полученные сухие образцы далее

исследовались методами SEM и рентгеновской дифракции.

Метод рентгеновской дифракции. Для исследования высушенных исходных и дезинтегрированных пленок использовали установку ДРОН-3М. Применялось рентгеновское излучение CuK_α .

Сканирующая электронная микроскопия (SEM). Пленки ЦГХ исследовали на сканирующем электронном микроскопе Supra 55VP фирмы Zeiss (Германия). Для обеспечения электропроводящих свойств образцов и исключения помех, вызванных накоплением поверхностного заряда при сканировании, а также для повышения контрастности, на образцы предварительно напыляли слой платины толщиной 15 – 20 нм. Этот слой наносился методом катодного распыления на установке Quorum-150 (Великобритания). Затем образцы приклеивали двусторонним электропроводящим скотчем на столик микроскопа. Для изучения мор-

фологии поверхности использовали режим вторичных электронов (SE2).

Энергодисперсионный микрорентгено-спектральный анализ (ЭДС). Элементный состав образцов и состав отдельных фаз определяли с помощью системы микроанализа INCA Energy с детектором X-Max-80 фирмы Oxford, комплектуемой с микроскопом Supra 55VP. Для идентификации фаз в образце регистрировали спектры как со всей его поверхности, так и с ее отдельных точек.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Известно [7 – 11], что макромолекулы целлюлозы, мономерным звеном которых является целлобиоза, имеют тенденцию к взаимоупорядочению за счет внутри- и межмолекулярных водородных связей. Согласно данным рентгеноструктурного анализа, SEM и TEM, **формирование простран-**

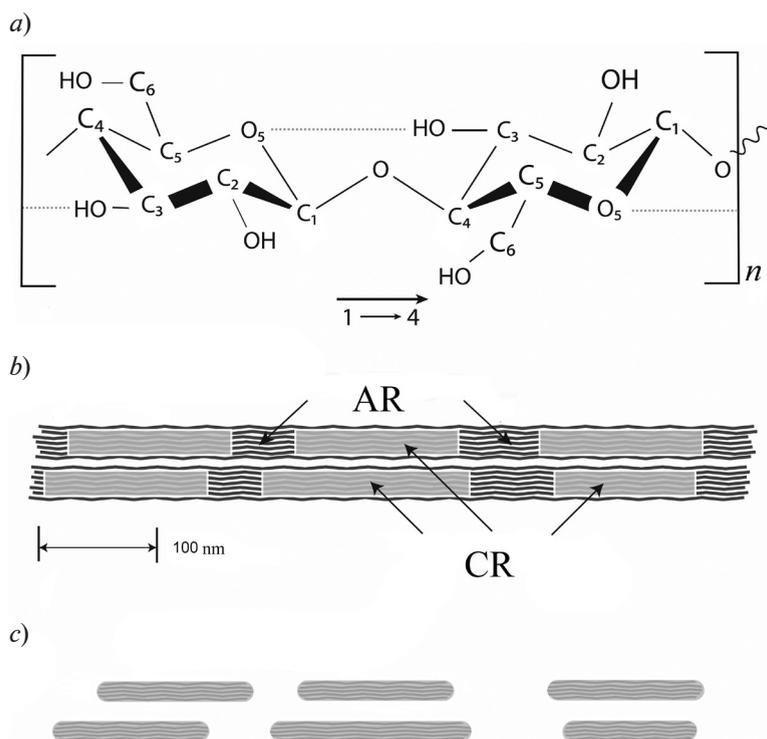


Рис. 1. Схемы строения моновзена макромолекулы целлюлозы (a), фрагмента ленты из макрофибрил в одной из предполагаемых конфигураций кристаллитных (CR) и аморфных (AR) областей (b), а также одиночных нанокристаллов ЦГХ после растворения неупорядоченных областей кислотным гидролизом (c).
Стрелка указывает направление связи $C_1 - C_4$ (a)



ственной морфологической структуры НПП ЦГХ включает образование микрофибрилл (состоят примерно из семи ориентационно-упорядоченных макромолекул целлюлозы); далее развивается упорядочение этих микрофибрилл в макрофибриллы; последние создают упорядоченные ленты с наноканалами между ними.

Вследствие конформационных сбоев в присоединении звеньев целлобиозы в процессе биосинтеза, микрофибриллы состоят

из чередующихся кристаллитов и аморфных участков, «необходимых» в упаковке микрофибрилл, чтобы обеспечить гибкость в пространственной морфологической структуре целлюлозы. На рис. 1 представлена известная [8] схема строения мономерного звена макромолекулы целлюлозы, ленты и одиночных кристаллитов ЦГХ.

На рис. 2 представлены дифрактограммы нативной и дезинтегрированной пленок ЦГХ. Видно, что в обоих случаях наблюда-

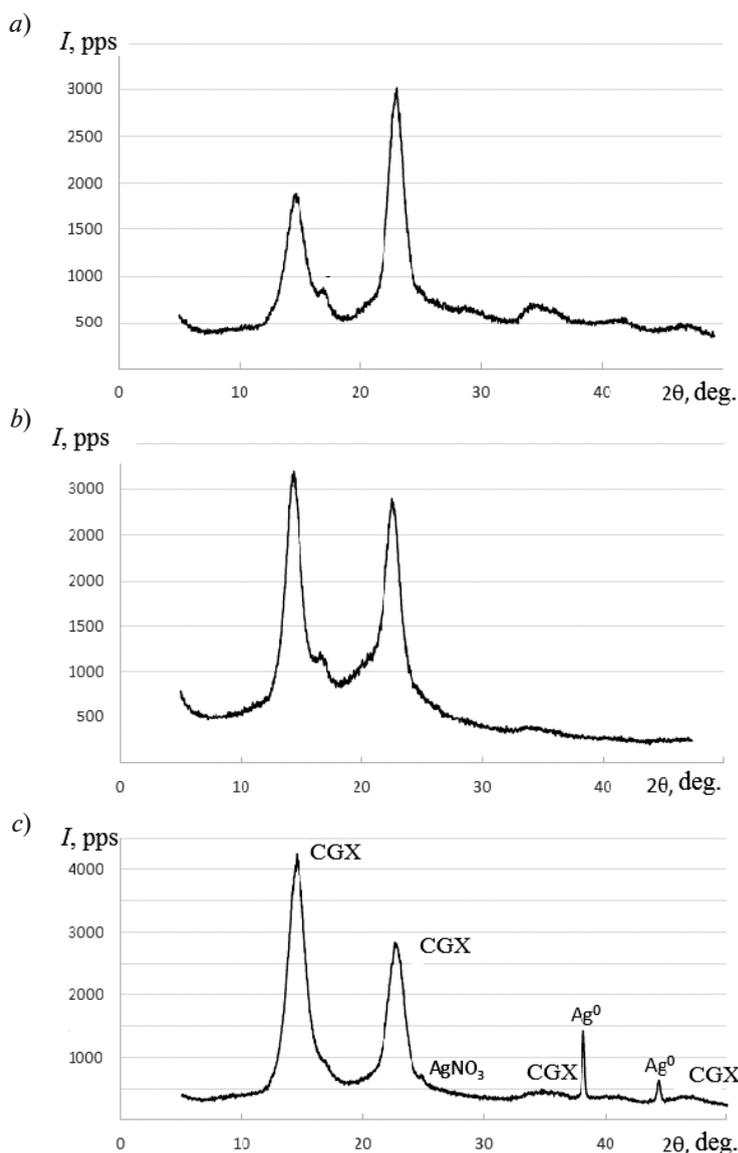


Рис. 2. Дифрактограммы пленок ЦГХ: исходной нативной (a), морфологически более упорядоченной, дезинтегрированной (b) и обработанной раствором AgNO₃ в процессе ее дезинтеграции (c)

Таблица

Результаты энергодисперсионного анализа образцов ЦГХ, обработанных 1%-м раствором AgNO_3

| Пленка ЦГХ | Химический состав, ат.% | | | | Ag/N |
|--------------------|-------------------------|-----|------|------|------|
| | C | N | O | Ag | |
| Нативная | 72,0 | 0,3 | 26,0 | 1,7 | 5,7 |
| Дезинтегрированная | 54,5 | 5,5 | 30,0 | 10,0 | 1,8 |

ется три основных пика рассеяния рентгеновских лучей, которые локализованы при значениях 2θ , равных $15,0^\circ$, $16,6^\circ$ и $22,4^\circ$, что указывает на сохранение морфологической структуры целлюлозы после дезинтеграции пленки ЦГХ. Ширина пиков отражает частичную кристалличность ЦГХ. Меньшая ширина и большая высота первого пика интенсивности (рис. 2, *b*) указывает на увеличение степени ориентационного порядка

в кристаллических объектах после дезинтеграции пленки ЦГХ и свидетельствует (как показано в работе [7]), о сохранении постоянной стехиометрии коллоидов в водных суспензиях. На дифрактограмме, представленной на рис. 2, *c*, фиксируются области, отражающие наличие наночастиц серебра Ag^0 и нитрата серебра AgNO_3 в нативной и дезинтегрированной пленках ЦГХ (дезинтеграция проведена в присутствии раствора

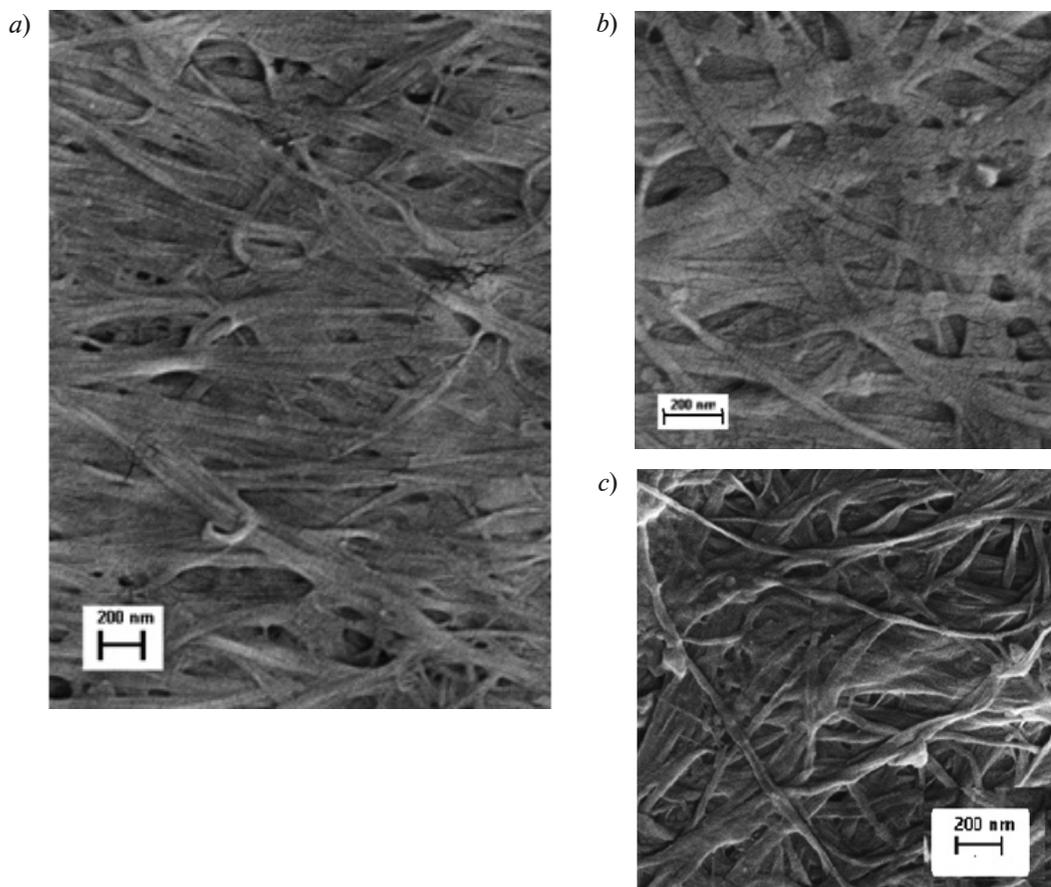


Рис. 3. Микрофотографии высушенных пленок нативной (*a*, *b*) и дезинтегрированной (*c*) ЦГХ, полученные методом SEM при увеличении в 50 тыс. (*a*, *c*) и в 130 тыс. (*b*) раз



серебра). Такая идентификация подтверждается данными элементного микроанализа (см. таблицу), с помощью которого получены усредненные сравнительные результаты содержания химических элементов в нативной и дезинтегрированной пленках ЦГХ, обработанных 1%-м раствором AgNO_3 .

На рис. 3 приведены микрофотографии пленок нативной и дезинтегрированной ЦГХ, полученные методом SEM при различном увеличении. На рис. 3, *a* видны характерные ленточные структуры из фибрилл, а при большем увеличении (рис. 3, *b*) в микрофибриллах можно наблюдать чередующиеся участки кристаллитов (их размер составляет около 10 нм) и аморфных областей. На снимках рис. 3, *c* отчетливо различимы объекты дезинтеграции пленок ЦГХ: отдельные разорванные ленты и хаотично расположенные единичные макрофибриллы.

На рис. 4 представлены фотография и микрофотография высушенной пленки нативной ЦГХ, предварительно обработанной 1%-м раствором AgNO_3 . На поверхности пленки (рис. 4, *a*) видны дендриты восстановленного серебра, визуализирующие элементы ленточной морфологической струк-

туры ЦГХ. На микрофотографии (рис. 4, *b*) различимы как дендриты, так и наночастицы серебра (30 – 80 нм), заполняющие пространство между лентами.

Иная картина имеет место в высушенных пленках водных суспензий дезинтегрированной ЦГХ, полученных введением в блендер 1%-го раствора AgNO_3 в процессе дезинтеграции ЦГХ. На рис. 5 представлена микрофотография таких пленок, на которых фиксируется образование наночастиц Ag^0 размером 10 – 50 нм, находящихся в пустотах сетки, образованной фрагментами лент дезинтегрированной ЦГХ. Следует отметить, что наночастицы серебра формируются вблизи элементов морфологической структуры ЦГХ.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что в образцах высушенных пленок ЦГХ, обработанных 1%-м раствором AgNO_3 , содержатся как наночастицы Ag^0 , так и соль AgNO_3 . Образцы пленок неоднородны по содержанию наночастиц. Однако очевидно, что надмолекулярная структура ЦГХ обладает способностью восстанавливать атомы серебра из его соли и приводить к возникновению либо дендритов из атомов серебра в нативной ЦГХ, либо к обра-

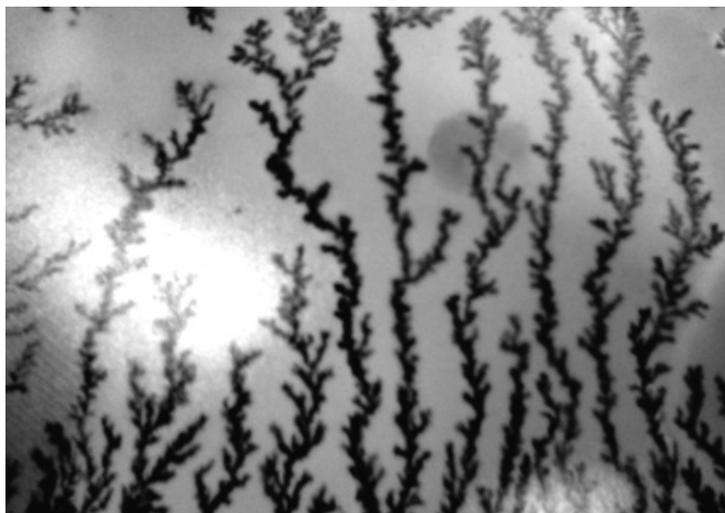
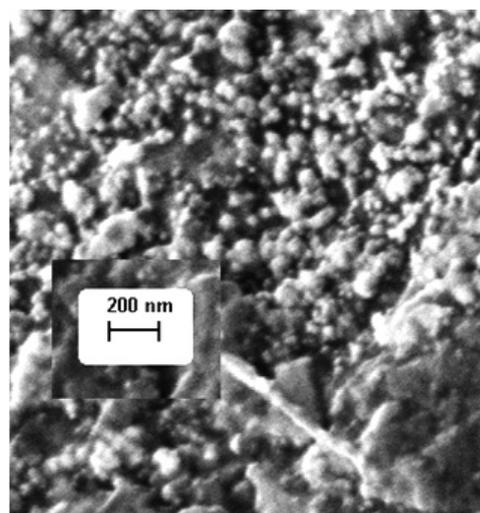
a)*b)*

Рис. 4. Фотография (*a*) и микрофотография, полученная методом SEM (*b*), высушенной нативной пленки ЦГХ, предварительно обработанной 1%-м раствором AgNO_3 . Увеличение в 1,5 (*a*) и в 50 тыс. (*b*) раз.

На фотографии дендриты восстановленного серебра визуализируют элементы надмолекулярной структуры образца

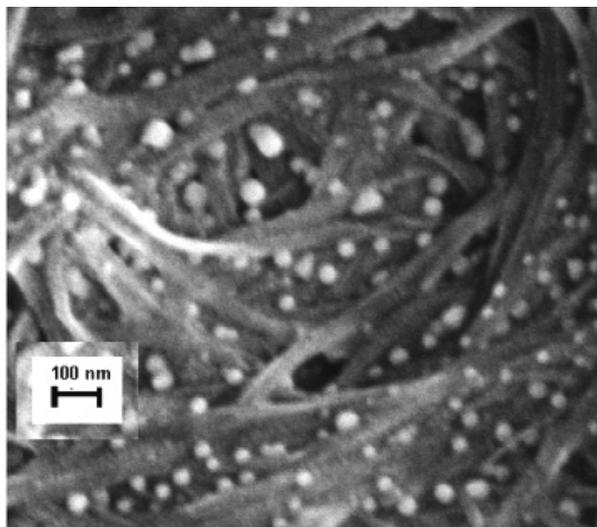


Рис. 5. Микрофотография пленки ЦГХ, обработанной 1%-м раствором AgNO_3 в процессе дезинтеграции. Получена методом SEM при увеличении в 100 тыс. раз

зованию изолированных наночастиц серебра при дезинтеграции ЦГХ в присутствии раствора AgNO_3 .

Это обстоятельство указывает на существование в изучаемой целлюлозе хемосорбционных взаимодействий, ответственных за ее восстановительную способность по отношению к атомам серебра вблизи элементов морфологической структуры. Такой результат расширяет представления о свойствах ЦГХ, для которой ранее были известны лишь молекулярные взаимодействия, а именно – внутри- и межмолекулярные водородные связи, а также Ван-дер-Ваальсовы связи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баклагина Ю.Г., Хрипунов А.К., Ткаченко А.А., Копейкин В.В., Матвеева Н.А., Лаврентьев В.К., Нилова В.К., Суханова Т.Е., Смыслов Р.Ю., Занавескина И.С., Клечковская В.В., Фейгин Л.А. Сорбционные свойства гель-пленок бактериальной целлюлозы // Журнал прикладной химии. 2005. Т. 78. № 7. С. 1197–1202.
2. Jozala A.A., de Lancastre-Novaes L.C., Lopes A.M., et al. Bacterial nanocellulose production and application: a 10-year overview // Appl. Microbiol. Biotechnol. 2016. Vol. 100. No. 5. Pp. 2063–2072.
3. Thompson N.S., Carlson J.A., Kaustinen

Выводы

Исследовано влияние механической дезинтеграции на морфологию нативной пленки целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus* (ЦГХ) с помощью методов сканирующей электронной микроскопии и рентгенодифракционного анализа. Установлено, что

в дезинтегрированных пленках сохраняется характерная для ЦГХ морфологическая структура. Однако происходит некоторое изменение ориентационного порядка и образование фоновой аморфной фазы из дезинтегрированных элементов;

в пленках нативной и дезинтегрированной ЦГХ, обработанных раствором нитрата серебра, присутствуют наночастицы серебра Ag^0 и остаточный нитрат серебра;

в высушенных и обработанных раствором пленках исходной нативной ЦГХ образуются дендриты из восстановленного серебра, которые видны невооруженным глазом и визуализируют ее морфологическую структуру;

в высушенных пленках ЦГХ, дезинтегрированных в присутствии 1%-го раствора нитрата серебра, обнаружены наночастицы серебра с преимущественным размером 10 – 50 нм, которые располагаются в вакуолях сетки ЦГХ вблизи элементов структуры.

Обнаружено существование в надмолекулярной структуре ЦГХ хемосорбционных взаимодействий, способных восстанавливать атомарное серебро из его соли.

- Н.М., Uhlin K.I. Tunnel structures in *Acetobacter xylinum* // Int. J. Biol. Macromol. 1988. Vol. 10. No. 2. Pp. 126–127.

4. Попов В.А. Раневый процесс: нанобиотехнологии оптимизации. СПб.: Спецлит, 2013. 199 с.

5. Хрипунов А.К., Степанова Т.П., Антоненкова Е.В., Ткаченко А.А., Попов В.А. О некоторых свойствах воды в наногель-пленках целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus* // Высокие технологии, экономика, промышленность. Сб. статей 13-й Междунар. научн.-практ. конф. «Фундаменталь-



ные и прикладные исследования, разработки и применение высоких технологий в промышленности и экономике». СПб., 24–26 мая 2012. Под ред. А.П. Кудинова. Т. 2. Ч. 1. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013. С. 261–262.

6. **Болотникова Л.С., Самсонова Т.И.** Зависимость между молекулярным весом и характеристической вязкостью целлюлозы в растворах кадмий-этилендиаминового комплекса // Высокомолекулярные соединения. 1964. Т. 6. № 3. С. 533–537.

7. **Хрипунов А.К., Степанова Т.П., Ткаченко А.А., Романов Д.П., Астапенко Е.П., Капралова В.М.** Диэлектрические свойства и микроструктура водных суспензий дезинтегрированных наногель-пленок бактериальной целлюлозы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 2. С. 45–57

8. **Moon R.J., Martini A., Nairn J., Simonsen**

J., Youngblood J. Cellulose nanomaterials review: structure, properties and nanocomposites // Chem. Soc. Rev. 2011. Vol. 40. No. 7. Pp. 3941–3994.

9. **Brown R.M., Jr.** The biosynthesis of cellulose // Journ. Mol. Sci. A. Pure Appl. Chem. 1996. Vol. A 33. No. 10. Pp. 1345–1373.

10. **Kondo T., Nojiri M., Hishikawa Yu., Togawa E., Romanovicz D., Brown, R.M., Jr.** Biodirected epitaxial nanodeposition of polymers on oriented macromolecular templates // Proc. of Nat. Acad. Sci. (PNAS). 2002. Vol. 99. No. 22. Pp. 14008–14013.

11. **Бабушкина Т.А., Климова Т.П., Штыкова Э.В., Дембо К.А., Волков В.В., Хрипунов А.К., Клечковская В.В.** Исследование гель-пленок целлюлозы *Acetobacter xylinum* и ее модифицированных образцов методами ЯМР ¹H, криопорометрии и малоуглового рентгеновского рассеяния // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 2. С. 344–349.

Статья поступила в редакцию 12.12.2017, принята к публикации 14.12.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ХРИПУНОВ Альберт Константинович — кандидат химических наук, старший научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199004, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31
xelmie@mail.macro.ru

СТЕПАНОВА Тамара Павловна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199004, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31
t_stepanova2005@mail.ru

САПРЫКИНА Наталья Николаевна — кандидат химических наук, старший научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199004, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31
saprykina@hq.macro.ru

АСТАПЕНКО Элла Павловна — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199004, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31
imc@hq.macro.ru

РОМАНОВ Дмитрий Павлович — кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. Макарова, 2
ichsran@isc.nw.ru

ТКАЧЕНКО Альбина Александровна — кандидат биологических наук, старший преподаватель Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9
albina.tkachenko@mail.ru

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kapralova2006@yandex.ru

REFERENCES

- [1] Yu.G. Baklagina, A.K. Khripunov, A.A. Tkachenko, et al., Sorption properties of gel films of bacterial cellulose, *Russian Journal of Applied Chemistry*. 78 (7) (2005) 1176–1181.
- [2] A.A. Jozala, L.C. de Lancastre-Novaes, A.M. Lopes, et al., Bacterial nanocellulose production and application: a 10-year overview, *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 100 (5) (2016) 2063–2072.
- [3] N.S. Thompson, J.A. Carlson, H.M. Kaustinen, K.I. Uhlin, Tunnel structures in *Acetobacter xylinum*, *Int. J. Biol. Macromol.* 10 (2) (1988) 126–127.
- [4] V.A. Popov, Ranevyy protsess: nanobiotehnologii optimizatsii [Wound process: optimization nanobiotechnologies], St. Petersburg, SpetsLit, 2013.
- [5] A.K. Khripunov, T.P. Stepanova, E.V. Antonenkova, et al., O nekotorykh svoystvakh vody v nano-gel-plenkakh tsellyulozy *Gluconacetobacter xylinus* [On some properties of water in the nanogel films of *Gluconacetobacter xylinus* cellulose], *High Technologies, Economics, Industry, Collection of Sci. Articles*, Ed. A.P. Kudinov, St. Petersburg, Polytechn. Univ. Publ. House, 2-1 (2013) 261–262.
- [6] L.S. Bolotnikova, T.I. Samsonova, Zavisimost mezhdru molekulyarnym vesom i kharakteristicheskoy vyazkostyu tsellyulozy v rastvorakh kadmii etilen diaminovogo kompleksa. [A correlation between a molecular weight and the viscosity of cellulose in the solutions of cadmium ethylene diamine complex], *Polymer Sci.* 6 (3) (1964) 533–537.
- [7] A.K. Khripunov, T.P. Stepanova, A.A. Tkachenko, et al., Dielectric properties and microstructure of the disintegrated nanogel films of bacterial cellulose, *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*. 10 (2) (2017) 45–57.
- [8] R.J. Moon, A. Martini, J. Nairn, et al., Cellulose nanomaterials review: structure, properties and nanocomposites, *Chem. Soc. Rev.* 40 (7) (2011) 3941–3944.
- [9] R.M. Brown, Jr. The biosynthesis of cellulose, *Journ. Mol. Sci., A. Pure Appl. Chem.* 1996. A 33 (10) (1996) 1345–1373.
- [10] T. Kondo, M. Nojiri, Yu. Hishikawa, et al., Biodirected epitaxial nanodeposition of polymers on oriented macromolecular templates, *Proc. of Nat. Acad. Sci. (PNAS)*. 99 (22) (2002) 14008–14013.
- [11] T.A. Babushkina, T.P. Klimova, E.V. Shtykova, et al., Study of gel films of *Acetobacter xylinum* cellulose and its modified samples by ¹H NMR, crioporometry and small-angle X-ray scattering, *Crystallography Reports*. 55 (2) (2010) 344–349.

Received 12.12.2017, accepted 14.12.2017.

THE AUTHORS

KHRIPUNOV Albert K.

Institute of Macromolecular Compounds RAS
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russian Federation
xelmie@mail.macro.ru

STEPANOVA Tamara P.

Institute of Macromolecular Compounds RAS
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russian Federation
t_stepanova2005@mail.ru

SAPRYKINA Nataliya N.

Institute of Macromolecular Compounds RAS
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russian Federation
saprykina@hq.macro.ru

ASTAPENKO Ella P.

Institute of Macromolecular Compounds RAS
31 Bolshoy Ave. V.O., St. Petersburg, 199004, Russian Federation
imc@hq.macro.ru



ROMANOV Dmitriy P.

I.V. Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry

2 Makarova Emb., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

ichsran@isc.nw.ru

TKACHENKO Albina A.

St. Petersburg State University

7-9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

albina.tkachenko@mail.ru

KAPRALOVA Victoria M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

kapralova2006@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.11112

УДК 539.12

ПОИСКИ ЧАСТИЦ ТЕМНОЙ МАТЕРИИ НА БОЛЬШОМ АДРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ

А.Е. Басалаев, Ю.Г. Нарышкин

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова национального
исследовательского центра «Курчатовский институт»,
г. Гатчина, Российская Федерация

Одним из перспективных направлений исследований на Большом адронном коллайдере (БАК) является поиск частиц темной материи. Несмотря на значительное число свидетельств о существовании такой материи, а также многочисленные эксперименты по ее поиску, природу этой субстанции до сих пор установить не удалось. Основная гипотеза заключается в том, что темная материя состоит из слабо взаимодействующих массивных частиц. Коллайдерные эксперименты по поиску таких частиц наиболее чувствительны в случае спин-зависимых взаимодействий, а также для малых масс частиц темной материи для спин-независимых взаимодействий. В данной работе описаны стратегии поисков частиц темной материи на БАКе и представлены верхние пределы для сечений рождения частиц темной материи в сравнении с результатами других экспериментов; при этом использованы экспериментальные данные, полученные в 2015 – 2016 гг. экспериментами ATLAS и CMS. В заключение обсуждаются перспективы дальнейших поисков темной материи на БАКе.

Ключевые слова: темная материя; большой адронный коллайдер; слабо взаимодействующие массивные частицы; моно- X

Ссылка при цитировании: Басалаев А.Е., Нарышкин Ю.Г. Поиски частиц темной материи на Большом адронном коллайдере // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 122 – 137. DOI: 10.18721/JPM.11112

DARK MATTER SEARCHES AT THE LARGE HADRON COLLIDER

A.E. Basalaev, Yu.G. Naryshkin

Petersburg Nuclear Physics Institute of National Research Center “Kurchatov Institute”,
Gatchina, Russian Federation

One of the promising lines of investigation at the Large Hadron Collider (LHC) is a search for dark matter particles. Despite a large body of evidence for dark matter existence, its nature remains unknown. The leading hypothesis is that dark matter consists of weakly interacting massive particles. Collider searches for such particles are most sensitive in the case of spin-dependent interactions, and for the low masses of dark matter particles in the case of spin-independent interactions. The strategies of dark matter searches at the LHC are described, and upper limits on dark matter-nucleon cross-sections based on the experimental data collected in 2015 and 2016 by the ATLAS and CMS collaborations are presented in comparison with the results of

other experiments. In conclusion, the perspectives of further searches of dark matter at the LHC are discussed.

Key words: dark matter; LHC; ATLAS; CMS; WIMP; dark matter associative production; mono- X

Citation: A.E. Basalaeв, Yu.G. Naryshkin, Dark matter searches at the Large Hadron Collider, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 122 – 137. DOI: 10.18721/JPM.11112

Введение

Одной из актуальных задач, стоящих перед экспериментами на Большом адронном коллайдере, который расположен в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН, Швейцария), является поиск частиц темной материи. Впервые гипотеза о существовании такой субстанции была выдвинута голландским астрономом Якобусом Каптейном в 1922 году по результатам изучения скоростей вращения галактик [1]. Широкое распространение термин «темная материя» получил после работ Фрица Цвикки [2].

На сегодняшний день известны астрофизические наблюдения, которые указывают на существование темной материи. К ним относятся изучение скоростей вращения галактик [3], гравитационное линзирование [4], структура скопления Пули [5] и т. п. Указание на небарионную природу темной материи следует из того, что теория первичного нуклеосинтеза предсказывает распространенность химических элементов во Вселенной, которая хорошо согласуется с наблюдаемой барионной материей [6]. Анализ распределения неоднородностей реликтового излучения также указывает на наличие небарионной темной материи [7].

В качестве одного из возможных образований темной материи рассматриваются массивные астрономические компактные объекты – MACHOS. Исследования гравитационного микролинзирования [8, 9] исключают вклад таких объектов с массами в диапазоне от $0,6 \cdot 10^{-7}$ до $15 M_{\odot}$ (M_{\odot} – масса Солнца) как возможных образований темной материи. Согласно последним оценкам, темная материя составляет около 26,8 % от полной массы-энергии Вселенной, в то время как доля барионной материи не превышает 5 % [10].

Несмотря на значительный объем косвенных свидетельств существования темной

материи, установить ее природу до сих пор не удалось. Для объяснения такого феномена предпринимались попытки построения теорий модифицированной гравитации, которые столкнулись со значительными трудностями при попытке объяснить все имеющиеся экспериментальные данные [11]. На сегодняшний день основная гипотеза заключается в том, что темная материя состоит из слабо взаимодействующих массивных частиц (Weakly Interacting Massive Particles, WIMPs) [12], которые взаимодействуют с веществом только посредством гравитации и некоего слабого взаимодействия.

Частицы темной материи появляются в некоторых расширениях Стандартной модели. Например, в минимальном суперсимметричном расширении Стандартной модели [13] одной из возможных частиц темной материи считается нейтралино (Lightest Supersymmetric Particle, LSP). В качестве частиц темной материи также рассматриваются стерильные нейтрино [14] и аксионы [15]. Подробный обзор частиц, подходящих на роль объектов темной материи, можно найти в работе [16].

В настоящее время проводятся различные эксперименты по поиску частиц темной материи. Эти опыты можно разделить на прямые, косвенные и коллайдерные.

В экспериментах по прямому поиску частиц темной материи изучаются эффекты взаимодействия частиц темной материи с ядрами мишени [17 – 19]. Подробный обзор прямых экспериментов можно найти в работе [20]. Как правило, такие исследования выполняются в лабораториях, расположенных глубоко под землей (для уменьшения фона), например, в лаборатории, расположенной в Гран-Сассо (Италия).

В экспериментах по косвенному поиску частиц темной материи изучаются эффекты, связанные с аннигиляцией частиц и античастиц темной материи, в результате

которой возникают частица и античастица Стандартной модели, например пары электрон-позитрон или протон-антипротон [21, 22]. В этих экспериментах измеряют отношение количества частиц к количеству античастиц в зависимости от энергии. На основе сравнения измеренных спектров с результатами расчетов, полученными для излучения от известных космических объектов, делаются выводы о существовании темной материи. Другой вариант косвенных экспериментов состоит в измерении потока гамма-излучения, превышение которого над ожидаемым свидетельствует об аннигиляции частиц с античастицами темной материи [23].

В третьем, коллайдерном, типе экспериментов осуществляется поиск частиц темной материи, которые рождаются в результате аннигиляции кварка и антикварка. Поиск таких частиц выполняется путем обнаружения отклонений экспериментальных спектров от предсказаний Стандартной модели.

К настоящему времени в некоторых исследованиях были получены указания на возможное существование частиц темной материи. Например, в эксперименте DAMA [24] изучалось рассеяние частиц темной материи на ядрах мишени. С этой целью измерялся спектр ядер отдачи в течение нескольких лет. Предполагается, что наша галактика находится в облаке темной материи. Поскольку Солнце движется относительно центра галактики со скоростью 220 км/с, а Земля, вращаясь вокруг Солнца со скоростью 30 км/с, движется с разной скоростью относительно центра галактики в различные периоды времени, частота взаимодействий частиц темной материи с ядрами мишени будет разной. В результате наблюдений были обнаружены годовые модуляции сигнала от рассеяния частиц на ядрах, на уровне 9,3 стандартных отклонений, которые можно объяснить рассеянием частиц темной материи на ядрах мишени.

В другом эксперименте — AMS II — были измерены энергетические спектры космических позитронов и антипротонов. Данные этих измерений отличаются от результатов расчетов, которые описывают

взаимодействие космических лучей с межзвездной средой, но хорошо согласуются с предсказаниями моделей, согласно которым существуют частицы темной материи с массой 1 ТэВ.

Тем не менее, чтобы сделать окончательные выводы о существовании частиц темной материи, необходимо исключить вклад излучения от дополнительных источников, например таких, как пульсары. Для этого необходимо исследовать энергетический спектр позитронов в области больших энергий свыше 1 ТэВ, что, в свою очередь, требует большего количества данных; их предполагается получить к 2025 году.

В данной статье представлен обзор исследований по поиску частиц темной материи (WIMPs), выполненных на Большом адронном коллайдере экспериментами ATLAS и CMS в 2015 – 2016 гг. при энергии протон-протонных взаимодействий $\sqrt{s} = 13$ ТэВ.

Эксперименты на коллайдере

Первые поиски частиц темной материи на коллайдере были выполнены в лаборатории Ферми на ускорителе Тэватрон в протон-антипротонных взаимодействиях в экспериментах CDF [25] и D0 [26] при энергии $\sqrt{s} = 1,96$ ТэВ.

В эксперименте CDF проводился анализ данных по ассоциативному рождению частиц темной материи и t -кварка. В результате этого исследования были установлены верхние пределы для сечения рождения частиц темной материи 0,5 пбн (пикобарн) для масс частиц темной материи в диапазоне 0 – 150 ГэВ/ c^2 .

В эксперименте D0 проводился анализ данных с целью поиска легкого калибровочного бозона, так называемого «темного фотона» γ_D , который предсказан минимальным суперсимметричным расширением Стандартной модели (MSSM). В результате анализа данных темный фотон γ_D не был обнаружен, но были установлены пределы для сечения его рождения.

С началом работы Большого адронного коллайдера поиски частиц темной материи идут по нескольким направлениям. В экспериментах на коллайдере изучается

образование частиц темной материи в результате аннигиляции кварка и антикварка, но при этом сами частицы темной материи не регистрируются детектором. Ввиду этого обстоятельства, регистрация событий с их рождением возможна только в процессах, где происходит образование дополнительных частиц. Например, в так называемом моно- X -канале при аннигиляции кварка и антикварка образуется частица-переносчик взаимодействия, которая далее распадается на частицы темной материи. При этом до аннигиляции кварка и антикварка один из них испускает фотон γ , Z - или W -бозон, или глюон, которые могут быть зарегистрированы детектором. Диаграмма Фейнмана для случая испускания глюона в начальном состоянии, с последующим образованием струи, показана на рис. 1, *a*.

В процессе ассоциативного рождения частиц темной материи (рис. 1, *b*) рождаются $b\bar{b}$ - или $t\bar{t}$ - пары кварков с последующим образованием адронных струй. При ассоциативном рождении частиц темной

материи вместо пары кварков может образоваться бозон Хиггса.

Еще одним направлением по поиску частиц темной материи является прямой поиск переносчика взаимодействия между частицами Стандартной модели и частицами темной материи, с помощью регистрации его распада на частицы Стандартной модели (рис. 1, *c*).

При анализе экспериментов, проводимых на коллайдере, применяется так называемый модельно-независимый анализ с использованием эффективной теории поля [27] или упрощенных моделей [28]. Предполагается, что частицы темной материи являются дираковскими фермионами.

В рамках эффективной теории поля описывается точечное взаимодействие двух частиц (кварка и антикварка) с последующим рождением частицы и античастицы темной материи. При таком описании поля присутствует два параметра: масса частицы (античастицы) темной материи, а также параметр

$$\Lambda^2 = M^2 / (g_\chi \cdot g_q),$$

где M – масса медиатора (частица-переносчик взаимодействия); g_χ, g_q – константы связи медиатора с частицами темной материи и кварками, соответственно. Этот параметр характеризует силу взаимодействия между частицами Стандартной модели и частицами темной материи.

Такой подход справедлив лишь при условии, если масса промежуточной частицы (медиатора) больше переданного импульса, т. е. $M \gg Q$. В связи с увеличением энергии столкновения на Большом адронном коллайдере до 13 ТэВ, это условие зачастую нарушается, и в настоящее время область применения эффективной теории поля сильно ограничена, поэтому используются упрощенные модели, для которых выполнение данного условия не требуется.

При использовании упрощенных моделей рассматриваются частица (и античастица) темной материи, а также переносчик взаимодействия между частицами Стандартной модели и частицами темной материи. Массы частиц темной материи m_χ и переносчика взаимодействия m_η задают-

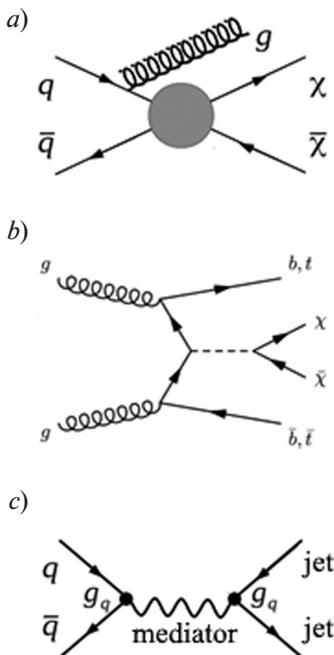


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана для процессов рождения частиц темной материи на Большом адронном коллайдере: *a* – моно- X -канал, *b* – ассоциативное рождение, *c* – поиски промежуточной частицы

ся как параметры. В качестве параметров также используют время жизни Γ (ширина распада) переносчика взаимодействия и его константы взаимодействия с частицами Стандартной модели и частицами темной материи (g_q и g_χ). Таким образом, применение упрощенной модели предполагает наличие пяти параметров.

Анализ данных выполняется в так называемой сигнальной области, т. е. в зоне, где вклад сигнальных событий по отношению к фоновым оказывается максимальным. Эта область выбирается на основе процедуры оптимизации отбора полезных событий. Для оптимизации используются как сигнальные, так и фоновые события, полученные с помощью моделирования методом Монте-Карло. Для оценки вклада фоновых процессов, к которым относятся процессы Стандартной модели, существуют различные методы, основанные как на расчетах с использованием моделирования методом Монте-Карло, так и на использовании экспериментальных данных. Методы оценки фона с использованием данных применяются в тех случаях, когда невозможно получить надежные оценки с помощью моделирования Монте-Карло из-за недостаточной точности описания процесса генератором событий и дополнительных неопределенностей, связанных как с описанием экспериментальной установки, так и функции отклика детектора. Как правило, такие оценки имеют большие систематические неопределенности. Для моделирования процессов рождения частиц темной материи используется генератор событий MadGraph [29]. При использовании упрощенных моделей рассматриваются различные типы переносчиков взаимодействия: векторный, аксиально-векторный, скалярный и псевдоскалярный, с различным набором констант связи и в широком диапазоне масс частиц [30]. Для окончательного выбора сигнальной области, т. е. зоны с максимальным вкладом сигнальных событий, используются критерии статистической значимости. В этой области проводится сравнение измеренных спектров со спектрами фоновых процессов.

Поиски в канале моно- X

Как уже изложено выше, при поиске частиц темной материи в канале моно- X , дополнительно регистрируется $Z(W)$ – бозон, фотон или струя [31 – 33]. Так например, в процессе моно- Z образуется Z -бозон, который может быть зарегистрирован по его распаду на электрон и позитрон, мюон и анти-мюон или кварк-антикварковую пару с образованием двух струй. Основным фоновым процессом в этом случае является рождение двух Z -бозонов (ZZ), один из которых распадается на регистрируемые частицы (электроны, мюоны или адроны), а второй – на нейтрино. Разделить сигнальный и фоновый процесс рождения пары Z -бозонов с помощью кинематических переменных невозможно. Вклад этого процесса в сигнальной области оценивается из Монте-Карло-моделирования. Вклад второго по величине процесса – одновременное рождение W - и Z -бозонов – оценивался с помощью метода, основанного на использовании экспериментальных данных. Вклад остальных фоновых процессов существенно меньше упомянутых выше и оценивался с помощью других методов, основанных на экспериментальных данных.

На рис. 2, *a* показан измеренный спектр недостающей поперечной энергии E_T^{miss} для процесса моно- Z после окончательного отбора событий в сигнальной области, полученный для интегральной светимости $36,1 \text{ (фбн)}^{-1}$ в эксперименте ATLAS. Для уменьшения вклада фона от процессов рождения Z -бозонов со струями рассматривались события с $E_T^{miss} > 90 \text{ ГэВ}$. Как видно из рис. 2, экспериментальные спектры в пределах статистических и систематических ошибок хорошо согласуются с оценками фоновых событий. Пунктирной линией показан результат моделирования сигнала для частицы темной материи с массой $m_\chi = 100 \text{ ГэВ}$ и медиатора с массой $m_{med} = 500 \text{ ГэВ}$, масштабированный с коэффициентом 0,27. На рис. 2, *b* показаны ограничения на массу частицы темной материи как функции массы промежуточной частицы, при распаде Z -бозона на пару электронов или мюонов, полученные в экс-

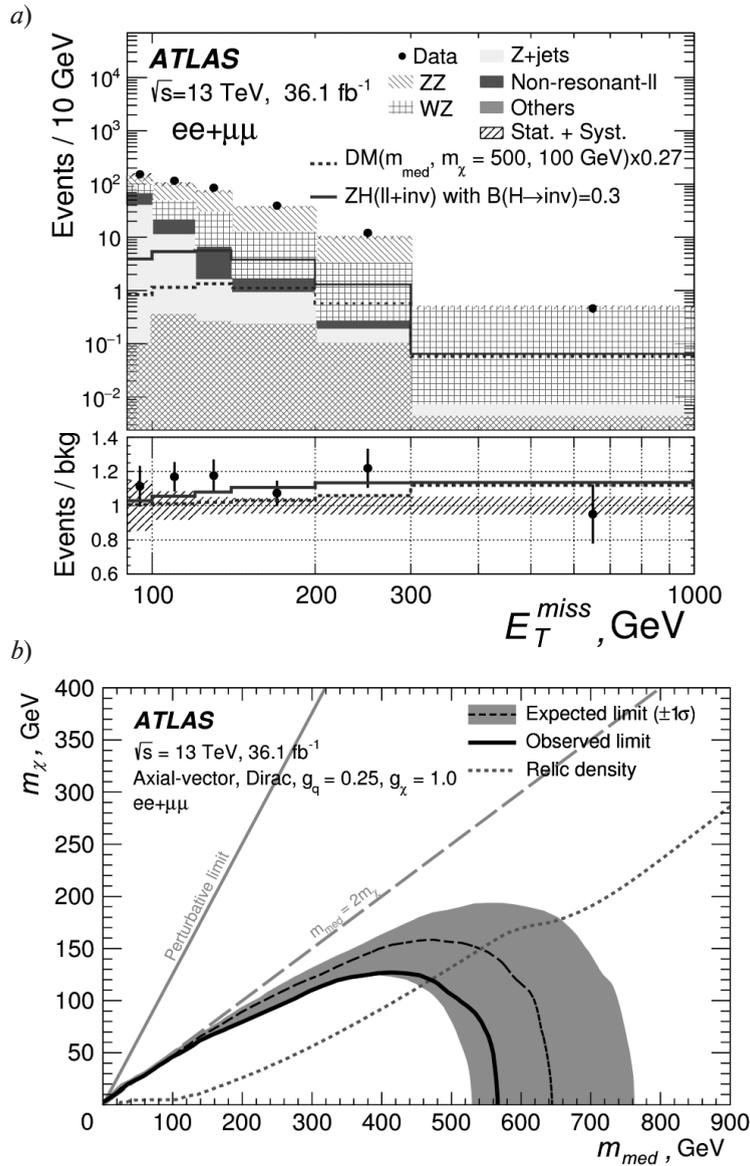


Рис. 2. Результаты поиска частиц темной материи в процессе моно- Z (эксперимент ATLAS, $\sqrt{s} = 13$ ТэВ): a – распределения по недостающей поперечной энергии E_T^{miss} для объединенных ee - и $\mu\mu$ -каналов; b – ожидаемые и наблюдаемые пределы для значений масс медиатора и частицы темной материи.

a – черными точками показаны данные, гистограммами – результаты оценки различных фоновых процессов, штрихами снизу-вверх – полная систематическая ошибка, пунктирной линией – результаты моделирования сигнальных событий для $m_c = 100$ ГэВ и $m_{\text{med}} = 500$ ГэВ

перименте ATLAS при анализе данных для аксиально-векторной модели переносчика взаимодействия и константами связи, равными $g_q = 2,5$ и $g_{\chi} = 1,0$. Область значений масс частиц, которая находится внутри сплошной линии, исключена [31]. Аналогичные результаты были получены в эксперименте CMS [34]. Поиски темной материи

в процессах моно- X с излучением в начальном состоянии W - или Z -бозонов с распадом на адроны представлены в работе [35].

Ассоциативное рождение частиц темной материи

При ассоциативном рождении, кроме частиц темной материи дополнительно

рождаются одна или две частицы. Например, при рождении скалярного или псевдоскалярного переносчика взаимодействия, который распадается на частицы темной материи, также рождаются $b\bar{b}$ - или $t\bar{t}$ -кварковые пары с последующей адронизацией в струи (см. рис. 1, *b*). В этом случае при отборе сигнальных событий обязательным условием является наличие двух b - или t -кварковых струй. Основными фоновыми

процессами в данном случае являются следующие:

рождение Z -бозона и двух струй, с последующим распадом Z -бозона на два нейтрино;

процессы с рождением $b\bar{b}$ - и $t\bar{t}$ -кварковых пар.

На рис. 3 показаны верхние пределы сечения рождения частиц темной материи в диапазоне масс от 10 ГэВ до 1 ТэВ, получен-

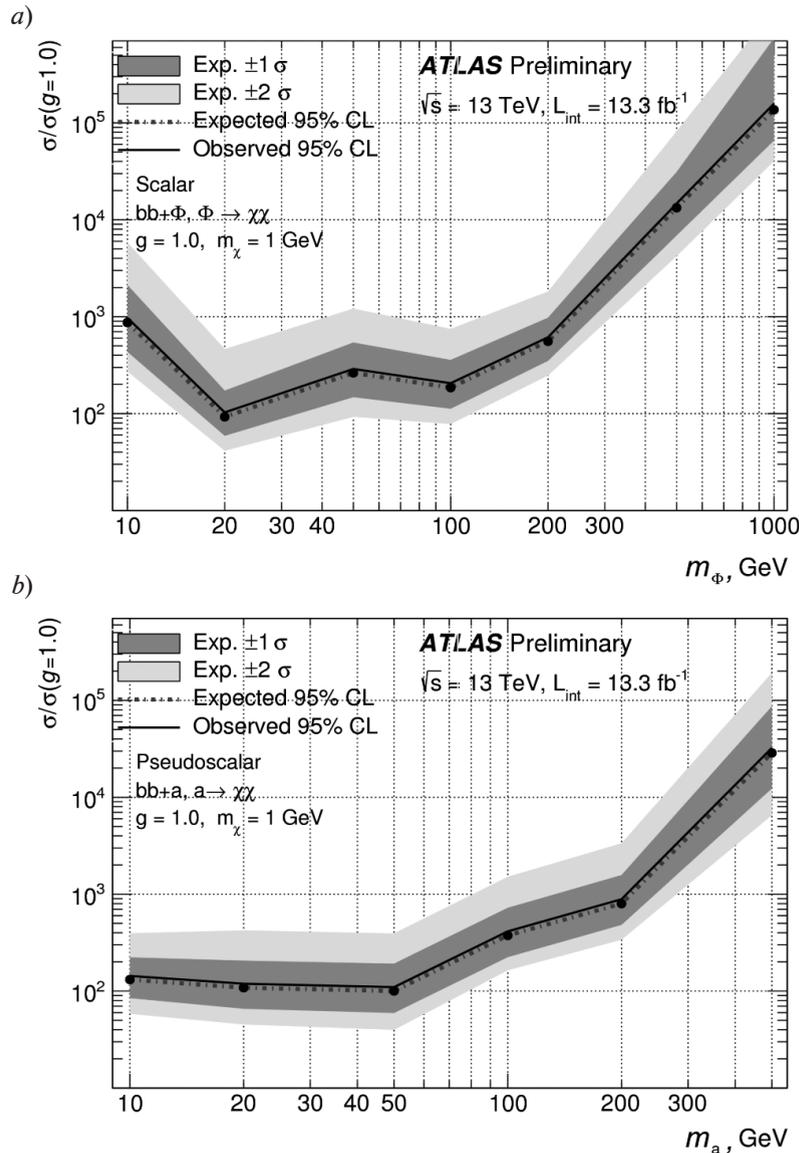


Рис. 3. Ожидаемые и наблюдаемые пределы (доверительный интервал 95 %) для сечений рождения частиц темной материи в зависимости от массы медиатора для случаев скалярного (*a*) и псевдоскалярного (*b*) медиаторов.

Расчеты сделаны для массы частицы темной материи, равной 1 ГэВ; $g_q = g_\chi = 1,0$. Проанализированы данные 2015–2016 гг.; интегральная светимость – $13,3 \text{ (фбн)}^{-1}$ при энергии в системе центра масс $\sqrt{s} = 13 \text{ ТэВ}$ [36]

ные в эксперименте ATLAS [36], для случая скалярного переносчика взаимодействия с массами в интервале 10 – 1000 ГэВ и для псевдоскалярного переносчика взаимодействия с массами в интервале 10 – 400 ГэВ, в зависимости от массы частицы темной материи, при значении константы связи $g_q = 1$. Результаты получены на основе ана-

лиза данных 2015–2016 годов при интегральной светимости 36,1 (фбн)⁻¹.

Исследуются также и другие варианты ассоциативного рождения частиц темной материи, например, некоторые расширения Стандартной модели предсказывают образование тяжелого векторного бозона Z' с последующим его распадом на ча-

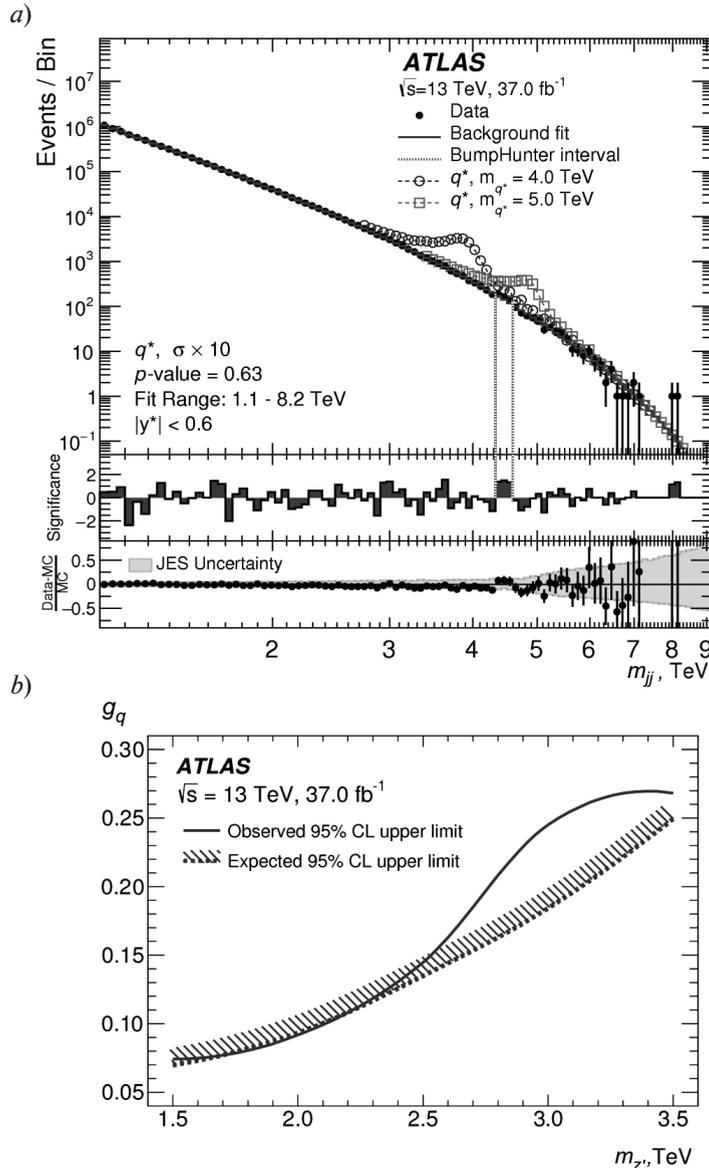


Рис. 4. Результаты исследований по прямому поиску медиатора темной материи (эксперимент ATLAS для двухструйных событий): *a* – спектры по инвариантной массе для данных, фоновых и сигнальных событий; *b* – полученные пределы (доверительный интервал 95 %) на константу g_q в зависимости от массы промежуточной частицы (модель Z' -медиатора описана в работе [41]).

В нижней части рис. 4, *a* представлено сравнение эксперимента с результатами моделирования Монте-Карло, сплошная полоска – систематическая ошибка

стицы темной материи [37], или на два бозона Хиггса: легкий нейтральный h и СР-нечетный псевдоскалярный нейтральный A^0 с последующим распадом A^0 на частицы темной материи $A^0 \rightarrow \chi\chi$ [38]. Рождение частиц темной материи возможно и при распаде тяжелого СР-четного нейтрального бозона Хиггса H [38].

Поиски переносчика взаимодействия

Переносчик взаимодействия между ча-

стицами Стандартной модели и частицами темной материи может также распадаться на частицы Стандартной модели, например кварки с образованием струй в конечном состоянии. Следует отметить, что прямые поиски переносчика взаимодействия возможны только в экспериментах на коллайдере. Существуют различные модели для частицы переносчика взаимодействия, например тяжелый векторный лептофобный бозон Z' , который имеет малое значение констан-

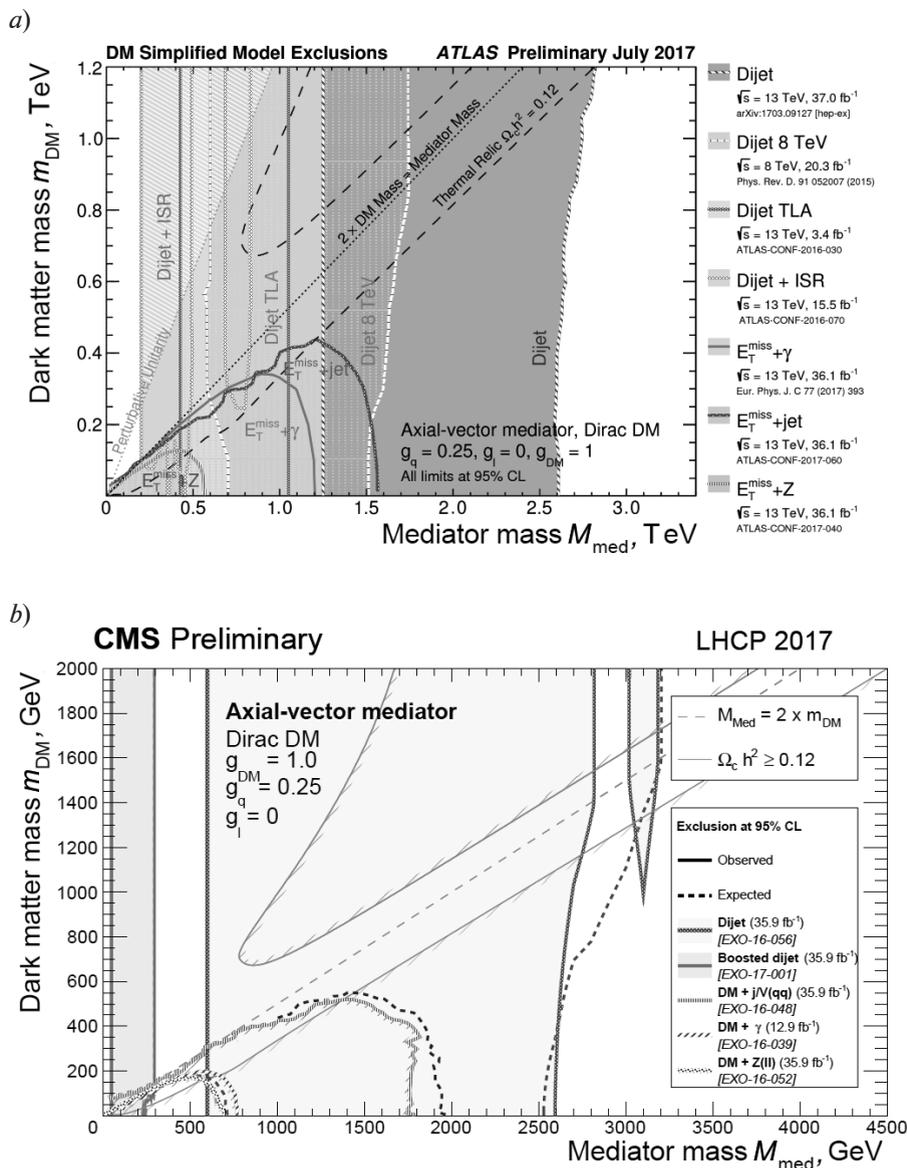


Рис. 5. Предельные значения для масс частицы темной материи в зависимости от массы промежуточной частицы, полученные в экспериментах ATLAS (a) и CMS (b).

При расчетах использовались константы взаимодействия медиатора с частицами темной материи $g_\chi = 1,00$ и с кварками $g_q = 0,25$ (одинаковы для всех типов кварков и для аксиально-векторного медиатора)



ты связи с лептонами [39], скалярные или псевдоскалярные частицы либо цветной скалярный переносчик взаимодействия [40]. На рис. 4, *a* показано распределение по инвариантной массе m_{ij} для двух струй, полученное в эксперименте ATLAS [41]. На этом же рисунке (кружки) показаны результаты

моделирования сигнальных событий для переносчиков взаимодействия с массами 4 и 5 ГэВ. Сплошной кривой показан результат аппроксимации распределения фона. Как видно из рисунка, данные хорошо согласуются с предсказаниями Стандартной модели в исследуемой области.

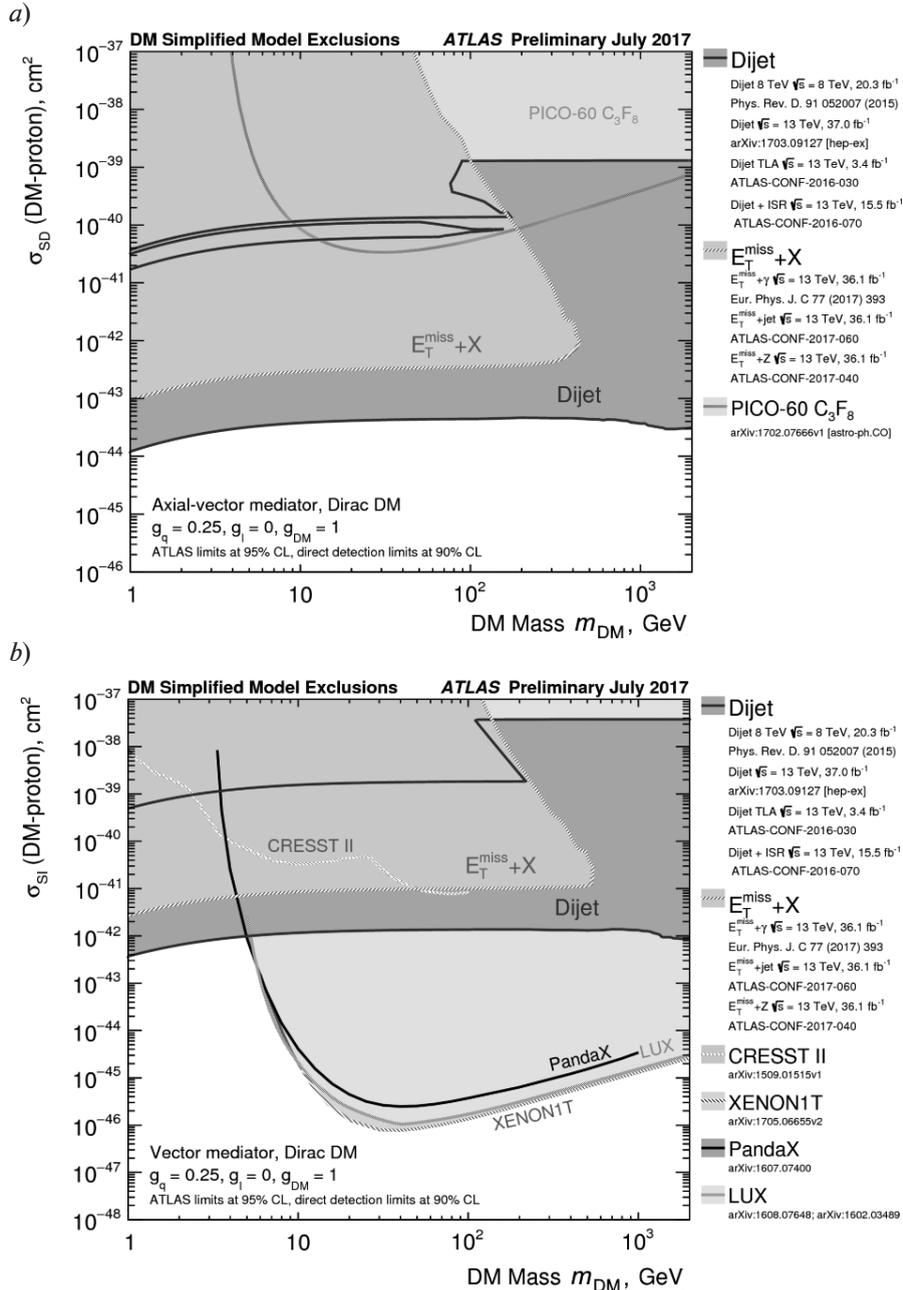


Рис. 6. Сравнение результатов, полученных в эксперименте ATLAS с результатами прямых измерений для спин-зависимых (a) и спин-независимых (b) сечений. Приведено сравнение с экспериментами PICO (a), а также с CRESST, XENON1T, LUX и PandaX (b)

Полученные пределы для значения константы связи переносчика взаимодействия с частицами Стандартной модели в зависимости от массы переносчика взаимодействия m_Z показаны на рис. 4, *b*. Для фиксированной массы сечение растёт с ростом значения g_q , и таким образом область значений слева и выше кривой – исключена.

Результаты коллайдерных экспериментов и их обсуждение

Предельные значения для масс частиц темной материи и аксиально-векторного медиатора, полученные в экспериментах ATLAS и CMS для процессов моно- X , ассоциативного рождения частиц темной материи и поисков частицы медиатора, для значений константы взаимодействия медиатора с частицами Стандартной модели $g_q = 0,25$ и медиатора с частицами темной материи $g_\chi = 1,00$ показаны на рис. 5. Как следует из приведенных данных, наиболее сильные ограничения на массу медиатора получены при анализе двухструйных событий.

Сравнение результатов, полученных на БАК в эксперименте ATLAS, с результатами экспериментов по прямому поиску показаны на рис. 6. При таком сравнении рассматриваются как спин-зависимые, так и спин-независимые взаимодействия. На указанном рисунке представлены верхние пределы для сечений взаимодействия частиц темной материи в зависимости от их массы, полученные в эксперименте ATLAS при анализе двухструйных событий [41 – 44] и в канале моно- X [31 – 33], причем приведено сравнение с результатами экспериментов по прямому поиску: CRESST [45], XENON1T [46], PICO [47], LUX [48] и PandaX [49]. Как следует из рис. 6, коллайдерные эксперименты в случае спин-зависимых взаимодействий оказываются более чувствительными, чем таковые по прямому поиску частиц темной материи (PICO, LUX). Для случая же спин-независимого взаимодействия (PandaX) результаты экспериментов по прямому поиску являются более чувствительными для значений масс частицы темной материи свыше 6 ГэВ.

Заключение

С начала работы Большого адронного коллайдера в экспериментах ATLAS и CMS было проведено большое количество исследований по поиску частиц темной материи в разных каналах. Для интерпретации результатов применялся модельно-независимый анализ с использованием различных гипотез для переносчика взаимодействия (векторный, аксиально-векторный, скалярный и псевдоскалярный). Был проанализирован большой диапазон возможных значений масс как частиц темной материи, так и переносчика взаимодействия, от 10 ГэВ до 1 ТэВ. Отклонений от предсказаний Стандартной модели не обнаружено, при этом установлены верхние пределы для сечений рождения частиц темной материи, а также для масс частиц темной материи в зависимости от массы переносчика взаимодействия. Представлены сравнения полученных пределов для сечений с результатами экспериментов по прямому поиску для спин-зависимого и спин-независимого взаимодействия: CRESST, XENON1T, PICO, LUX и PandaX. Установленные верхние пределы для сечений рождения частиц темной материи в экспериментах на Большом адронном коллайдере для случая спин-зависимого взаимодействия оказались ниже, чем для экспериментов по прямому измерению; другими словами, эксперименты на коллайдере были более чувствительны. В то же время для спин-независимых сечений эксперименты, проводимые на Большом адронном коллайдере, позволяют анализировать область масс частиц темной материи меньше 6 ГэВ, что недоступно в прямых измерениях.

Ожидается, что до конца второго периода набора данных на Большом адронном коллайдере будет накоплен объем данных, соответствующий интегральной светимости около 120 (фбн)^{-1} , что в 4 раза превышает имеющуюся интегральную светимость, использованную для представленных результатов. Для интерпретации данных предполагается использовать, в том числе, расширение Стандартной модели, включающее дополнительный дублет бозонов Хигг-



гса — модель 2HDM [50]. Кроме пределов для сечений в зависимости от массы частиц темной материи и переносчика взаимодействия, предполагается установить пределы для параметров моделей, например отно-

шения вакуумных средних двух хиггсовских полей $t\beta$ и угол смешивания α .

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 16-02-00015.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kapteyn J.C.** First attempt at a theory of the arrangement and motion of the sidereal system // *The Astrophysical Journal*. 1922. Vol. 55. Pp. 302–327.
2. **Zwicky F.** Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln // *Helvetica Physica Acta*. 1933. Vol. 6. Pp. 110–127.
3. **Rubin V.C., Thonnard N., Ford W.K., Jr.** Extended rotation curves of high-luminosity spiral galaxies. IV. Systematic dynamical properties, SA through SC // *The Astrophysical Journal Letters*. 1978. Vol. 225. Pp. L107–L111.
4. **Taylor A.N., Dye I S., Broadhurst T.J., Benitez N., van Kampen E.** Gravitational lens magnification and the mass of Abell 1689 // *The Astrophysical Journal*. 1998. Vol. 501. No. 2. Pp. 539–553.
5. **Markevitch M., Gonzalez A.H., Clowe D., et al.** Direct constraints on the dark matter self-interaction cross-section from the merging galaxy cluster 1E0657-56 // *The Astrophysical Journal*. 2003. Vol. 606. No. 2. Pp. 819–824.
6. **Patrignani C., Agashe K., Aielli G., et al.** (Particle Data Group). Big-Bang nucleosynthesis // *Chinese Physics. C*. 2016. Vol. 40. No. 10. P. 380.
7. **Canetti L., Drewes M., Shaposhnikov M.** Matter and antimatter in the universe // *New Journal of Physics*. 2012. Vol. 14. No. 9. P. 095012.
8. **Tisserand P., Le Guillou L., Afonso C., et al.** Limits on the MACHO content of the Galactic Halo from the EROS-2 survey of the Magellanic Clouds // *Astronomy and Astrophysics*. 2007. Vol. 469. No. 2. Pp. 387–404.
9. **Graff D.S., Freese K.** Analysis of a Hubble space telescope search for Red Dwarfs: Limits on baryonic matter in the Galactic Halo // *The Astrophysical Journal*. 1996. Vol. 456. No. 1. Pp. L49.
10. **Ade P.A.R., Aghanim N., Alves M.I.R., et al.** (Planck Collaboration). Planck 2013 results. I. Overview of products and scientific results // *Astronomy and Astrophysics*. 2014. Vol. 571. P. A1.
11. **Milgrom M.** A modification of the Newtonian dynamics as a possible alternative to the hidden mass hypothesis // *The Astrophysical Journal*. 1983. Vol. 270. Pp. 365–370.
12. **Kamionkowski M.** WIMP and axion dark matter. <https://arxiv.org/pdf/hep-ph/9710467>.
13. **Baer H., Tata X.** Weak scale supersymmetry: from superfields to scattering events. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 556 p.
14. **Dodelson S., Widrow L.M.** Sterile neutrinos as dark matter // *Physical Review Letters*. 1994. Vol. 72. No. 1. Pp. 17–20.
15. **Holman R., Lazarides G., Shafi Q.** Axions and the dark matter of the universe // *Physical Review. D*. 1983. Vol. 27. No. 4. P. 995.
16. **Feng J.L.** Dark matter candidates from particle physics and methods of detection // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*. 2010. Vol. 48. No.1 Pp. 495–545.
17. **Bernabei R., Belli P., Bussolotti A., et al.** The DAMA/LIBRA apparatus, 17 // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A*. 2008. Vol. 592. No. 3. Pp. 297–315.
18. **Aprile E., Aalbers J., Agostini F., et al.** First dark matter search results from the XENON1T experiment. <https://arxiv.org/pdf/1705.06655>.
19. **Davis J.H., McCabe C., Boehm C.** Quantifying the evidence for dark matter in CoGeNT data // *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*. 2014. Vol. 2014. No. 08. P. 014.
20. **Рябов В.А., Царев В.А., Цховребов А.М.** Поиски частиц темной материи // *Успехи физических наук*. 2008. Т. 178. № 11. С. 1129–1164.
21. **Aguilar M., Alberti M., Alpat G., et al.** (AMS Collaboration). First result from the Alpha magnetic spectrometer on the International space station: precision measurement of the positron fraction in primary cosmic rays of 0.5–350 GeV // *Physical Review Letters*. 2013. Vol. 110. No. 14. P. 141102.
22. **Casolino M., De Simone N., Bongue D., et al.** Two 2017s of flight of the Pamela experiment: results and perspectives. <https://arxiv.org/pdf/0810.4980> (2008).
23. **Ackermann M., Ajello M., Albert A., et al.** (Fermi-LAT Collaboration). The Fermi Galactic center GeV excess and implications for dark matter // *The Astrophysical Journal*. 2017. Vol. 840. No. 1. P. 43.
24. **Bernabei R., Belli P., Cappella F., et al.** (DAMA-LIBRA Collaboration). Model independent result on possible diurnal effect in DAMA/LIBRA-phase 1 // *The European Physical Journal. C*. 2014. Vol. 74. No. 3. P. 2827.

25. **Aaltonen T., Alvarez Gonzalez B., Amerio S., et al.** (CDF Collaboration). Search for a dark matter candidate produced in association with a single top quark in pp collisions at $\sqrt{s} = 1.96$ TeV // *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 108. No. 20. P. 201802.

26. **Abazov V.M., Abbott B., Abolins M., et al.** (D0 Collaboration). Search for dark photons from supersymmetric hidden valleys // *Physical Review Letters*. 2009. Vol. 103. No. 8. P. 081802.

27. **Liem S., Bertone G., Calore F., et al.** Effective field theory of dark matter: a global analysis // *Journal of High Energy Physics*. 2016. Vol. 2016. No. 9. P. 077.

28. **Alves D., Arkani-Hamed N., Arora S., et al.** Simplified models for LHC new physics searches // *Journal of Physics. G*. 2012. Vol. 39. No 10. P 105005.

29. **Alwall J., Frederix R., Frixione S., et al.** The automated computation of tree-level and next-to-leading order differential cross sections, and their matching to parton shower simulations // *Journal of High Energy Physics*. 2014. Vol. 2014. No. 7. P. 079.

30. **Albert A., Backovic M., Boveia A., et al.** Recommendations of the LHC dark matter working group: Comparing LHC searches for heavy mediators of dark matter production in visible and invisible decay channels. <https://arxiv.org/pdf/1703.05703>.

31. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for an invisibly decaying Higgs boson or dark matter candidates produced in association with a Z boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <http://cds.cern.ch/record/2273610/files/ATLAS-CONF-2017-040.pdf>.

32. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for dark matter at $\sqrt{s} = 13$ TeV in final states containing an energetic photon and large missing transverse momentum with the ATLAS detector // *The European Physical Journal. C*. 2017. Vol. 77. No. 6. P. 393.

33. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for dark matter and other new phenomena in events with an energetic jet and large missing transverse momentum using the ATLAS detector. <http://cds.cern.ch/record/2273876/files/ATLAS-CONF-2017-060.pdf>

34. **Khachatryan V., Sirunyan A.M., Tumasyan A. et al.** (CMS Collaboration). Search for dark matter, invisible Higgs boson decays, and large extra dimensions in the $Z \rightarrow ll + E_T^{miss}$ final state using 2016 data. <http://inspirehep.net/record/1599663/files/EXO-16-052-pas.pdf>.

35. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for dark matter produced in association with a hadronically decaying

vector boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector // *Physics Letters B*. 2016. Vol. 763. Pp. 251–268.

36. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for dark matter production associated with bottom quarks with 13.3 fb⁻¹ of pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector at the LHC. <http://cds.cern.ch/record/2206279/files/ATLAS-CONF-2016-086.pdf>.

37. **Alves A., Berlin A., Profumo S., Farinaldo S.Q.** Dark matter complementarity and the Z' portal // *Phys. Rev. D*. 2015. Vol. 92. No. 8. P. 083004.

38. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration) Search for dark matter in association with a Higgs boson decaying to two photons at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <https://arxiv.org/pdf/1706.03948>.

39. **Buckley M.R., Hooper D., Rosner J.L.** A leptophobic Z' and dark matter from grand unification // *Physics Letters. B*. 2011. Vol. 703. No. 3. Pp. 343–347.

40. **Ko P., Natale A., Park M., Yokoya H.** Simplified DM models with the full SM gauge symmetry: the case of t -channel colored scalar mediators // *Journal of High Energy Physics*. 2017. Vol. 2017. No. 1. P. 86.

41. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for new phenomena in dijet events using 37 fb⁻¹ of pp collision data collected at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <https://arxiv.org/pdf/1703.09127>.

42. **Aad G., Abbott B., Abdallah J., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for new phenomena in the dijet mass distribution using pp collision data at $\sqrt{s} = 8$ TeV with the ATLAS detector // *Physical Review. D*. 2015. Vol. 91. No. 5. P. 052007.

43. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for light dijet resonances with the ATLAS detector using a Trigger-object level analysis in LHC pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV. <http://inspirehep.net/record/1470774/files/ATLAS-CONF-2016-030.pdf>.

44. **Aaboud M., Aad G., Abbott B., et al.** (ATLAS Collaboration). Search for new light resonances decaying to jet pairs and produced in association with a photon or a jet in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <http://inspirehep.net/record/1480050/files/ATLAS-CONF-2016-070.pdf>.

45. **Angloher G., Bento A., Bucci C., et al.** (CREST Collaboration). Results on light dark matter particles with a low-threshold CREST-II detector // *The European Physical Journal. C*. 2016. Vol. 76. No. 1. P. 25.

46. **Aprile E., Aalbers J., Agostini F., et al.** (XENON Collaboration). First dark matter search



results from the XENON1T experiment. <https://arxiv.org/pdf/1705.06655>.

47. **Amole C., Ardid M., Arnquist I.J., et al.** (PICO Collaboration). Dark matter search results from the PICO-60C₃F₈ bubble chamber // Physical Review Letters. 2017. Vol. 118. No. 25. P. 251301.

48. **Akerib D.S., Alsum S., Araujo H.M., et al.** (LUX Collaboration). Results from a search for dark matter in the complete LUX exposure // Physical

Review Letters. 2017. Vol. 118. No. 2. P. 021303.

49. **Tan A., Xiao M., Cui X. et al.** (PandaX-II Collaboration). Dark matter results from first 98.7 days of data from the PandaX-II experiment // Physical Review Letters. 2016. Vol. 117. No. 12. P. 121303.

50. **Craig N., Galloway J., Thomas S.** Searching for signs of the second Higgs doublet. <https://arxiv.org/pdf/1305.2424>.

Статья поступила в редакцию 02.10.2017, принята к публикации 06.12.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАСАЛАЕВ Артём Евгеньевич – стажер-исследователь Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра (НИЦ) «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области, Российская Федерация.

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
artem.basalaev@cern.ch

НАРЫШКИН Юрий Германович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области, Российская Федерация.

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
yury.naryshkin@cern.ch

REFERENCES

[1] **J.C. Kapteyn**, First attempt at a theory of the arrangement and motion of the sidereal system, *Astrophysical Journal*. 55 (1922) 302–327.

[2] **F. Zwicky**, Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln, *Helvetica Physica Acta*. 6 (1933) 110–127.

[3] **V.C. Rubin, N. Thonnard, W.K.Jr. Ford**, Extended rotation curves of high-luminosity spiral galaxies. IV – Systematic dynamical properties, SA through SC, *The Astrophysical Journal Letters*. 225 (1978) L107–L111.

[4] **A.N. Taylor, S. Dye1, T.J. Broadhurst, N. Benitez, E. van Kampen**, Gravitational lens magnification and the mass of Abell 1689, *The Astrophysical Journal*. 501 (2) (1998) 539–553.

[5] **M. Markevitch, A.H. Gonzalez, D. Clowe, et al.**, Direct constraints on the dark matter self-interaction cross-section from the merging galaxy cluster 1E0657-56, *The Astrophysical Journal*. 606 (2) (2003) 819–824.

[6] **C. Patrignani, K. Agashe, G. Aielli, et al.** (Particle Data Group), Big-Bang nucleosynthesis, *Chinese Physics C*. 40 (10) (2016) 380.

[7] **L. Canetti, M. Drewes, M. Shaposhnikov**, Matter and antimatter in the universe, *New Journal of Physics*. 14 (9) (2012) 095012.

[8] **P. Tisserand, L. Le Guillou, C. Afonso, et al.**, Limits on the Macho content of the Galactic

Halo from the EROS-2 survey of the Magellanic Clouds, *Astronomy and Astrophysics*. 469 (2) (2007) 387–404.

[9] **D.S. Graff, K. Freese**, Analysis of a Hubble Space telescope search for Red Dwarfs: Limits on baryonic matter in the galactic halo, *The Astrophysical Journal*. 456 (1) (1996) L49.

[10] **P.A.R. Ade, N. Aghanim, M.I.R. Alves, et al.** (Planck Collaboration), Planck 2013 results. I. Overview of products and scientific results, *Astronomy and Astrophysics*. 571 (2014) A1.

[11] **M. Milgrom**, A modification of the Newtonian dynamics as a possible alternative to the hidden mass hypothesis, *The Astrophysical Journal* 270 (1983) 365–370.

[12] **M. Kamionkowski**, WIMP and Axion dark matter. Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/hep-ph/9710467>.

[13] **H. Baer, X. Tata**, Weak scale supersymmetry: from superfields to scattering events, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.

[14] **S. Dodelson, L.M. Widrow**, Sterile-neutrinos as dark matter, *Physical Review Letters*. 72 (1) (1994) 17–20.

[15] **R. Holman, G. Lazarides, Q. Shafi**, Axions and the dark matter of the universe. *Physical Review D*. 27 (4) (1983) 995.

[16] **J.L. Feng**, Dark matter candidates from particle physics and methods of detection, *Annual*

Review of Astronomy and Astrophysics. 48 (1) (2010) 495–545.

[17] **R. Bernabei, P. Belli, A. Bussolotti, et al.**, The DAMA/LIBRA apparatus, 17, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. 592 (3) (2008) 297–315.

[18] **E. Aprile, J. Aalbers, F. Agostini et al.**, First dark matter search results from the XENON1T experiment. Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/1705.06655>.

[19] **J.H. Davis, C. McCabe, C. Boehm**, Quantifying the evidence for dark matter in CoGeNT data, Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. 2014 (08) (2014) 014.

[20] **V.A. Ryabov, V.A. Tsarev, A.M. Tskhovrebov**, The search for dark matter particles, Physics-Uspexhi. 51 (11) (2008) 1091–1121.

[21] **M. Aguilar, M. Alberti, G. Alpat, et al.** (AMS Collaboration), First result from the Alpha magnetic spectrometer on the International space station: precision measurement of the positron fraction in primary cosmic rays of 0.5–350 GeV, Physical Review Letters. 110 (14) (2013) 141102.

[22] **M. Casolino, N. De Simone, D. Bongue, et al.**, Two years of flight of the Pamela experiment: results and perspectives. <https://arxiv.org/pdf/0810.4980>, (2008).

[23] **M. Ackermann, M. Ajello, A. Albert A., et al.** (Fermi-LAT Collaboration), The Fermi Galactic center GeV excess and implications for dark matter, The Astrophysical Journal. 840 (1) (2017) 43.

[24] **R. Bernabei, P. Belli, F. Cappella, et al.** (DAMA-LIBRA Collaboration), Model independent result on possible diurnal effect in DAMA/LIBRA-phase 1, The European Physical Journal. C. 74 (3) (2014) 2827.

[25] **T. Aaltonen, B. Alvarez Gonzalez, S. Amerio, et al.** (CDF Collaboration), Search for a dark matter candidate produced in association with a single top quark in pp collisions at $\sqrt{s} = 1.96$ TeV, Physical Review Letters, 108 (20) (2012) 201802.

[26] **V.M. Abazov, B. Abbott, M. Abolins, et al.** (D0 Collaboration), Search for dark photons from supersymmetric hidden valleys, Physical Review Letters. 103 (8) (2009) 081802.

[27] **S. Liem, G. Bertone, F. Calore, et al.**, Effective field theory of dark matter: a global analysis, Journal of High Energy Physics. 2016 (9) (2016) 077.

[28] **D. Alves, N. Arkani-Hamed, S. Arora, et al.**, Simplified models for LHC new physics searches, Journal of Physics. G. 39 (2012) 105005.

[29] **J. Alwall, R. Frederix, S. Frixione, et al.**, The automated computation of tree-level and next-to-leading order differential cross sections, and their matching to parton shower simulations, Journal of

High Energy Physics. 2014 (7) (2014) 079.

[30] **A. Albert, M. Backovic, A. Boveia, et al.**, Recommendations of the LHC dark matter working group: Comparing LHC searches for heavy mediators of dark matter production in visible and invisible decay channels, Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/1703.05703>.

[31] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.** (ATLAS Collaboration), Search for an invisibly decaying Higgs boson or dark matter candidates produced in association with a Z boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <http://cds.cern.ch/record/2273610/files/ATLAS-CONF-2017-040.pdf>.

[32] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.** (ATLAS Collaboration), Search for dark matter at $\sqrt{s} = 13$ TeV in final states containing an energetic photon and large missing transverse momentum with the ATLAS detector, The European Physical Journal. C. 77 (6) (2017) 393.

[33] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.**, Search for dark matter and other new phenomena in events with an energetic jet and large missing transverse momentum using the ATLAS detector, <http://cds.cern.ch/record/2273876/files/ATLAS-CONF-2017-060.pdf>.

[34] **A. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al.**, Search for dark matter, invisible Higgs boson decays, and large extra dimensions in the $Z \rightarrow ll + E_T^{miss}$ final state using 2016 data. Rezhim dostupa: <http://inspirehep.net/record/1599663/files/EXO-16-052-pas.pdf>.

[35] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.** (ATLAS Collaboration), Search for dark matter produced in association with a hadronically decaying vector boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector, Physics Letters B. 763 (2016) 251–268.

[36] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.**, Search for dark matter production associated with bottom quarks with 13.3 fb^{-1} of pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector at the LHC. Rezhim dostupa: <http://cds.cern.ch/record/2206279/files/ATLAS-CONF-2016-086.pdf>.

[37] **A. Alves, A. Berlin, S. Profumo, F.S. Queiroz**, Dark matter complementarity and the Z' portal, Phys. Rev. D. 92 (8) (2015) 083004.

[38] **M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al.**, Search for dark matter in association with a Higgs boson decaying to two photons at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/1706.03948>.

[39] **M.R. Buckley, D. Hooper, J.L. Rosner**, A leptophobic Z' and dark matter from grand unification, Physics Letters. B. 703 (2011) 343–347.

- [40] P. Ko, A. Natale, M. Park, H. Yokoya, Simplified DM models with the full SM gauge symmetry: the case of t -channel colored scalar mediators, *Journal of High Energy Physics*. 2017 (1) (2017) 086.
- [41] M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott, et al., Search for new phenomena in dijet events using 37 fb⁻¹ of pp collision data collected at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/1703.09127>.
- [42] G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah, et al. (ATLAS Collaboration), Search for new phenomena in the dijet mass distribution using pp collision data at $\sqrt{s} = 8$ TeV with the ATLAS detector, *Physical Review D*. 91 (5) (2015) 052007.
- [43] G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah, et al. (ATLAS Collaboration), Search for light dijet resonances with the ATLAS detector using a Trigger-object level analysis in LHC pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV. Rezhim dostupa: <http://inspirehep.net/record/1470774/files/ATLAS-CONF-2016-030.pdf>.
- [44] G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah, et al. (ATLAS Collaboration), Search for new light resonances decaying to jet pairs and produced in association with a photon or a jet in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <http://inspirehep.net/record/1480050/files/ATLAS-CONF-2016-070.pdf>.
- [45] G. Angloher, A. Bento, C. Bucci, et al. (CRESST Collaboration), Results on light dark matter particles with a low-threshold CRESST-II detector, *The European Physical Journal C*. 76 (1) (2016) 25.
- [46] E. Aprile, J. Aalbers, F. Agostini, et al. (XENON Collaboration), First dark matter search results from the XENON1T experiment. <https://arxiv.org/pdf/1705.06655>.
- [47] C. Amole, M. Ardid, I.J. Arnuist, et al. (PICO Collaboration), Dark matter search results from the PICO-60C₃F₈ bubble chamber, *Physical Review Letters*. 118 (25) (2017) 251301.
- [48] D.S. Akerib, S. Alsum, H.M. Araujo, et al. (LUX Collaboration), Results from a search for dark matter in the complete LUX exposure, *Physical Review Letters*. 118 (2) (2017) 021303.
- [49] A. Tan, M. Xiao, X. Cui, et al. (PandaX-II Collaboration), Dark matter results from first 98.7 days of data from the PandaX-II experiment, *Physical Review Letters*. 117 (12) (2016) 121303.
- [50] N. Craig, J. Galloway, S. Thomas, Searching for signs of the second Higgs doublet. Rezhim dostupa: <https://arxiv.org/pdf/1305.2424>.

Received 02.10.2017, accepted 06.12.2017.

THE AUTHORS

BASALAEV Artyom E.

Petersburg Nuclear Physics Institute of National Research Center "Kurchatov Institute"
Orlova Roscha, Gatchina,
188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
artem.basalaev@cern.ch

NARYSHKIN Yuriy G.

Petersburg Nuclear Physics Institute of National Research Center "Kurchatov Institute"
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
yury.naryshkin@cern.ch

DOI: 10.18721/JPM.11113

УДК 537.86, 621.396.67

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ТРЕХСЛОЙНОЙ ФЕРРИТ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

А.С. Черепанов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе рассматривается задача о распространении волн в прямоугольном волноводе, содержащем трехслойную структуру феррит-диэлектрик-феррит (ФДФ). Расчет открытой ФДФ-структуры обычно сталкивается с большими трудностями. Предложенный подход позволил получить строгое решение для волноводных мод, у которых отсутствует зависимость полей от координаты, направленной вдоль подмагничивающего поля. Именно такой является основная мода ФДФ-структуры, которая определяет главные свойства фазированной антенной решетки. Показано, что полученные соотношения с высокой точностью описывают и моды открытого ФДФ-волновода. Рассчитаны зависимости постоянных распространения мод от подмагничивающего поля, найдены структуры электромагнитного поля для основной и высших мод, определены оптимальные параметры структуры, при которых управляемость ФДФ-структуры постоянным магнитным полем максимальна.

Ключевые слова: феррит; волновод; антенна; диэлектрическая структура; подмагничивающее поле

Ссылка при цитировании: Черепанов А.С. Распространение электромагнитных волн в трехслойной феррит-диэлектрической структуре // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 138 – 146. DOI: 10.18721/JPM.11113

ELECTROMAGNETIC WAVE PROPAGATION IN THE THREE-LAYER FERRITE-DIELECTRIC-FERRITE STRUCTURE

A.S. Cherepanov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

A problem of wave propagation in a rectangular waveguide containing a three-layer ferrite-dielectric-ferrite (FDF) structure has been considered in the paper. The calculation of a free-space FDF structure usually runs into difficulties. The proposed approach has been made it possible to obtain a rigorous solution for the waveguide modes for which there is no dependence of electromagnetic fields on a coordinate directed along a magnetizing magnetic field. It is the main mode of the FDF structure that governs principal properties of a phased array. The obtained relationships were shown to describe the modes' behavior for a free-space FDF waveguide. The dependences of the mode propagation constants on the magnetizing magnetic field were calculated, electromagnetic field structures of the main and the higher modes were found. The optimal structure parameters were determined. They are optimal when the controllability of the FDF structure by a constant magnetic field is maximal.

Key words: ferrite; waveguide; antenna; dielectric structure; magnetizing magnetic field

Citation: A.S. Cherepanov, Electromagnetic wave propagation in the three-layer ferrite-dielectric structure, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 138 – 146. DOI: 10.18721/JPM.11113

Введение

На сегодняшний день остается актуальной задача создания фазированных антенных решеток, обладающих оптимальными техническими параметрами и низкой стоимостью. Одним из вариантов решения такого вопроса является использование электрически управляемых структур феррит-диэлектрик-феррит (ФДФ) для конструирования интегральных фазированных антенных решеток (ИФАР) [1 – 3]. Подобные антенные решетки имеют простую конструкцию, допускающую их изготовление методами интегральной технологии, что обеспечивает низкую стоимость производства.

ФДФ-структура представляет собой открытый волновод, работающий в многомодовом режиме. Электродинамический анализ такой структуры затруднителен, поскольку волновод является открытым (неэкранированным) и содержит намагниченный феррит, который представляет собой невзаимную среду. Ввиду указанных при-

чин анализ можно выполнить лишь приближенно.

Представляет интерес нахождение строгого дисперсионного уравнения, описывающего свойства хотя бы основного типа волн в таком волноводе (именно свойства основного типа волн в ФДФ определяют важнейшие характеристики ИФАР). Это позволит глубже изучить физические свойства предложенной структуры и оптимизировать антенну.

В данной работе предлагается рассмотреть трехслойную ФДФ-структуру в закрытом прямоугольном волноводе. Как известно, в ряде случаев [4, 5] картину распределения электромагнитных волн в таких волноводах удается описать строго. Ниже будет показано, что при высоком значении диэлектрической проницаемости диэлектрической пластины в ФДФ-структуре электромагнитное поле вне этой структуры достаточно быстро убывает, так что наличие стенок у волновода практически не оказывает влияния на основную моду.

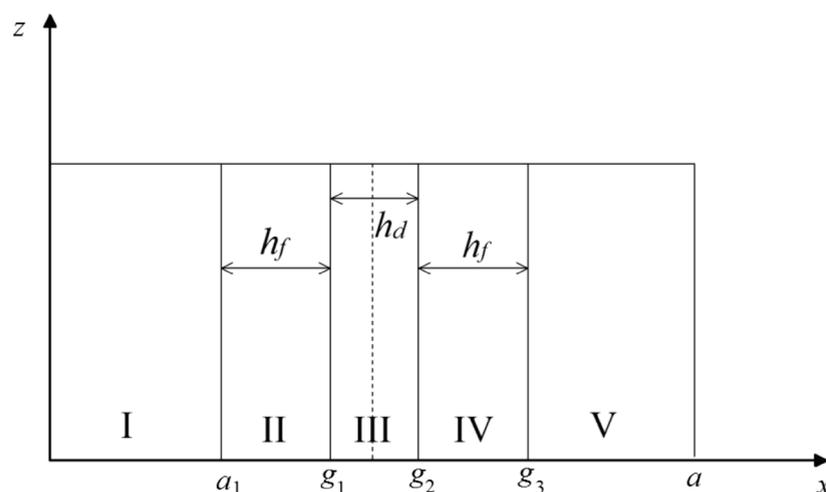


Рис. 1. Схематическое представление ФДФ-структуры в прямоугольном волноводе: a – ширина волновода; $a_1, g_1 - g_3$ – остальные геометрические параметры; h_f, h_d – величины ширины ферритовых (II, IV) и диэлектрической (III) пластин, соответственно; области I, V – воздушное пространство;

внешнее подмагничивающее магнитное поле направлено по оси z

Постановка и решение задачи

Итак, рассмотрим задачу о прямоугольном волноводе с двумя ферритовыми пластинами и расположенной между ними диэлектрической пластиной (рис. 1). Внешнее подмагничивающее магнитное поле направлено по оси z (ферритовые пластины намагничиваются встречно).

Тензор магнитной проницаемости феррита запишем в виде

$$\hat{\mu} = \begin{bmatrix} \mu & i\mu_a & 0 \\ -i\mu_a & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{\parallel} \end{bmatrix},$$

где i – мнимая единица; $\mu, \mu_a, \mu_{\parallel}$ – компоненты тензора магнитной проницаемости [4, 7, 8].

В работе [4] показано, что при отсутствии зависимости полей от координаты z в прямоугольном волноводе отличными от нуля остаются только компоненты E_z электрического поля и H_x, H_y -компоненты магнитного поля. При этом компонента E_z в феррите удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 E_z}{dx^2} + v_f^2 E_z = 0, \tag{1}$$

где $v_f^2 = k^2 \varepsilon_f \mu_{\perp} - \beta^2$ (k – волновое число пустого пространства, ε_f – диэлектрическая проницаемость феррита, β – искомая постоянная распространения волны в волноводе;

$$\mu_{\perp} = \frac{\mu^2 - \mu_a^2}{\mu}.$$

Компоненты магнитного поля в феррите могут быть найдены при помощи следующих соотношений [4]:

$$H_x = \frac{1}{k\mu_{\perp}} \left(\beta E_z - \frac{\mu_a}{\mu} \frac{dE_z}{dx} \right), \tag{2}$$

$$H_y = \frac{j}{k\mu_{\perp}} \left(\beta \frac{\mu_a}{\mu} E_z - \frac{dE_z}{dx} \right). \tag{3}$$

Соотношения (1) – (3) описывают поля областей II и IV (ферритовые пластины). Аналогичные соотношения выполняются и для области III (диэлектрик), и для областей I, V (воздух).

Отличие заключается лишь в изменении материальных параметров. Так, для диэлектрика вместо величины v_f^2 будет записана величина

$$v_d^2 = k^2 \varepsilon_d - \beta^2,$$

где ε_d – диэлектрическая проницаемость области III.

В воздушных областях I и V вместо v_f^2 будет $v_0^2 = k^2 - \beta^2$. Аналогично в этих областях изменится вид соотношений (2) и (3).

Можно записать решение уравнения (1) для всех пяти областей и применить к ним граничные условия: равенство нулю компоненты E_z на боковых стенках и непрерывность касательных компонент полей (E_z и H_y) на границе раздела между областями.

С учетом вышеизложенного, мы можем записать поля по областям волновода I – V (см. рис. 1):

I. $E_z = A \sin(v_0 x),$

II. $E_z = B \sin[v_f(x - a_1)] + C \cos[v_f(x - a_1)],$

III. $E_z = D \sin[v_d(x - a_1 - h_f)] + E \cos[v_d(x - a_1 - h_f)],$

IV. $E_z = F \sin[v_f(x - a_1 - h_f - h_d)] + G \cos[v_f(x - a_1 - h_f - h_d)],$

V. $E_z = I \sin[v_0(a - x)].$

Здесь граничные условия на боковых стенках уже учтены.

В итоге мы приходим к однородной системе линейных уравнений восьмого порядка с неизвестными коэффициентами A, B, C, D, E, F, G, I . Нетривиальное решение данной системы существует лишь при равенстве нулю ее детерминанта:

$$\det \hat{Z} = \begin{vmatrix} z_{AA} & 0 & z_{AC} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ z_{BA} & z_{BB} & z_{BC} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{CB} & z_{CC} & 0 & z_{CE} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{DB} & z_{DC} & z_{DD} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{ED} & z_{EE} & 0 & z_{EG} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{FD} & z_{FE} & z_{FF} & z_{FG} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{GF} & z_{GG} & z_{GI} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{IF} & z_{IG} & z_{II} & 0 \end{vmatrix} = 0. \tag{4}$$

Итак, мы получили дисперсионное уравнение, позволяющее найти постоянные распространения мод трехслойного волновода, и, прежде всего, основной моды. При этом полученное уравнение является строгим, т. е. точность решения будет определяться только точностью процедуры вычисления его корней.

Отличные от нуля элементы матрицы \hat{Z} приведены ниже:

$$\begin{aligned} z_{AA} &= \sin(v_0 a_1), \quad z_{AC} = -1; \\ z_{BA} &= -v_0 \cos(v_0 a_1), \quad z_{BB} = v_f / \mu_{\perp}, \\ z_{BC} &= -\beta \mu_a / \mu \mu_{\perp}; \\ z_{CB} &= \sin(v_f h_f), \quad z_{CC} = \cos(v_f h_f), \quad z_{CE} = -1; \\ z_{DB} &= \frac{1}{\mu_{\perp}} \left[\frac{\beta \mu_a}{\mu} \sin(v_f h_f) - v_f \cos(v_f h_f) \right], \\ z_{DC} &= \frac{1}{\mu_{\perp}} \left[\frac{\beta \mu_a}{\mu} \cos(v_f h_f) - v_f \cos(v_f h_f) \right], \\ z_{DD} &= v_d; \\ z_{ED} &= \sin(v_d h_d), \quad z_{EE} = \cos(v_d h_d), \quad z_{EG} = -1; \\ z_{FD} &= v_d \cos(v_d h_d), \quad z_{FE} = -v_d \sin(v_d h_d), \\ z_{FF} &= -v_f / \mu_{\perp}, \quad z_{FG} = \beta \mu_a / \mu \mu_{\perp}; \\ z_{GF} &= \sin(v_f h_f), \quad z_{GG} = \cos(v_f h_f), \\ z_{GI} &= -\sin(v_0 a_1); \\ z_{IF} &= \frac{1}{\mu_{\perp}} \left[-\frac{\beta \mu_a}{\mu} \sin(v_f h_f) - v_f \cos(v_f h_f) \right], \\ z_{IG} &= \frac{1}{\mu_{\perp}} \left[-\frac{\beta \mu_a}{\mu} \cos(v_f h_f) + v_f \cos(v_f h_f) \right], \\ z_{II} &= -v_0 \cos(v_0 a_1). \end{aligned}$$

Исследование волноводных мод ФДФ-структуры

Путем решения дисперсионного уравнения (4) можно получить зависимость постоянной распространения β от недиагонального члена тензора $\hat{\mu}$ (т. е., фактически, от подмагничивающего поля), а также от других параметров. Далее, если использовать данные работ [4 – 6, 2, 3], то можно найти структуру полей каждой моды. В статье [6] была предложена и экспериментально проверена комбинация параметров ФДФ-структуры, позволившая создать работоспособную ИФАР. Однако об оптимальности такой комбинации параметров никаких заключений сделать было нельзя. Теперь же, имея аналитическое решение для основной моды ФДФ-волновода, такое исследование оказывается возможным.

В статье [6] были рассмотрены ФДФ-волноводы, параметры которых приведены в табл. 1.

На рис. 2 приведена зависимость величины замедления $q = \beta / k$ двух мод ФДФ-волновода, полученная с использованием параметров из табл. 1, от величины недиагонального члена μ_a тензора $\hat{\mu}$ (остальные элементы тензора полагаются равными единице). Результат соответствует полученному в работе [6].

На рис. 3 показана зависимость управляемости ФДФ-волновода

$$\Delta q = (\beta_{\max} - \beta_{\min}) / k$$

от толщины ферритовых пластин h_f / a . Остальные параметры были приняты такими же, что и ранее (см. табл. 1).

Из рис. 3 видно, что управляемость Δq растет с ростом толщины пластин, одна-

Таблица 1

Параметры ФДФ-волноводов, использованные в работе [6]

| ka | h_f / a | h_d / a | ϵ_f | ϵ_d |
|------|-----------|-----------|--------------|--------------|
| 4,82 | 0,097 | 0,042 | 12 | 40 |

Обозначения: h_f, h_d – величины ширины ферритовых и диэлектрической пластин, соответственно; ϵ_f, ϵ_d – их диэлектрические проницаемости; k – волновое число пустого пространства; a – ширина прямоугольного волновода.

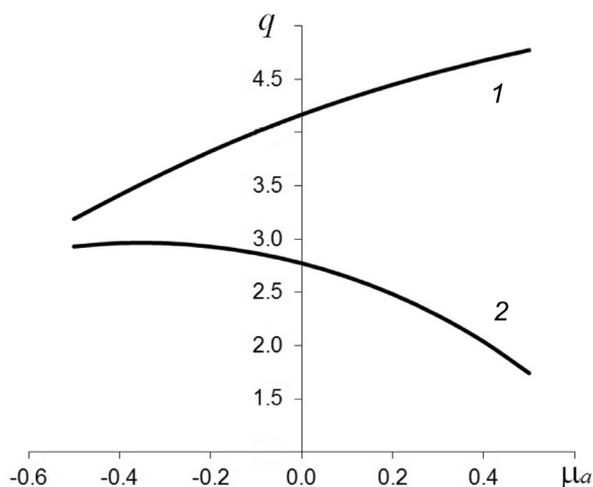


Рис. 2. Зависимость величины замедления $q = \beta / k$ основной (1) и второй (2) мод ФДФ-волновода от величины недиагонального члена μ_a тензора μ ; использованы параметры из табл. 1

ко скорость роста для значений толщины $h_f / a > 0,1$ резко падает. Это связано с тем, что феррит эффективно взаимодействует с электромагнитной волной лишь в тех областях, где поляризация магнитного поля близка к круговой; при этом величина поля должна быть достаточно велика. Эти области расположены вблизи диэлектрической пластины. При использовании толстых ферритовых пластин захватываются области, где магнитное поле мало. Поэтому большого приращения управляемости не

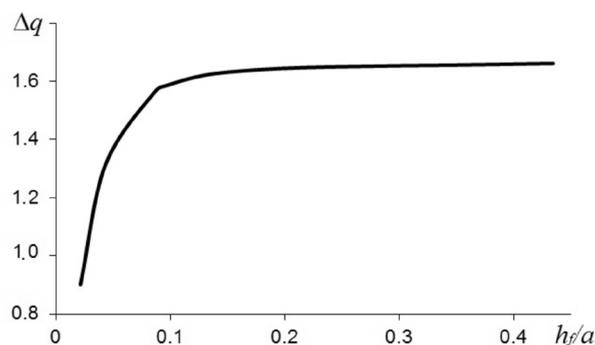


Рис. 3. Зависимость управляемости ФДФ-волновода $\Delta q = (\beta_{\max} - \beta_{\min}) / k$ от нормированной толщины ферритовых пластин h_f / a ; использованы параметры из табл. 1

получается. Большое количество феррита в ФДФ-волноводе ведет к увеличению потерь волновода, а также к увеличению его веса. Поэтому целесообразно выбирать толщину пластины согласно неравенству $h_f / a < 0,1$. Указанная в работе [6] величина $h_f / a = 0,097$ представляется оправданной.

Исследуем теперь зависимость управляемости Δq от толщины диэлектрика h_d . На рис. 4 представлена зависимость Δq от h_d/a (остальные параметры взяты из табл. 1). На графике видно, что имеется оптимальное значение толщины диэлектрика, обеспечивающее максимальную управляемость.

Физический смысл присутствия диэлектрической пластины в ФДФ-волноводе заключается в том, что она «втягивает в себя» электромагнитное поле, так что энергия распространяется по волноводу внутри нее и в непосредственной близости от нее, т. е. там, где находится феррит. Этим и обеспечивается хорошая управляемость. Если же диэлектрик имеет слишком большую толщину, то поле концентрируется в нем, а на феррит приходится малая величина электромагнитного поля, в результате чего управляемость падает. Слишком тонкий диэлектрик оказывается не в состоянии сконцентрировать поле, много энергии распространяется вне феррита, и управляемость также падает.

На рис. 5 представлены зависимости нормированной компоненты электрическо-

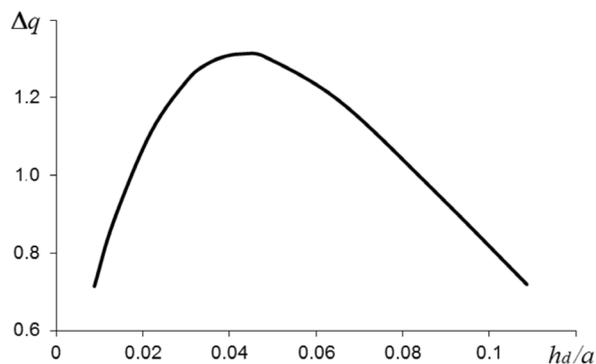


Рис. 4. Зависимость управляемости Δq от нормированной толщины диэлектрика h_d/a ; использованы параметры из табл. 1

Таблица 2

Набор использованных параметров и итог расчета величины замедления электромагнитных волн, распространяющихся в ФДФ-структуре

| Параметр | Обозначение | Единица измерения | Значение параметра |
|--|--------------|-------------------|--------------------|
| Ширина феррита диэлектрика | h_f | см | 0,224 |
| | h_d | | 0,096 |
| Недиагональный член тензора магнитной проницаемости феррита [7, 8] | μ_a | — | + 0,5 |
| Диэлектрическая постоянная феррита диэлектрика | ϵ_f | — | 12 |
| | ϵ_d | | 40 |
| Частота СВЧ-излучения | f | ГГц | 10 |
| Ширина волновода | a | см | 2,3; 3,0; 4,0; 5,0 |
| Полученное значение величины замедления $q = \beta / k$ составляет 4,774 для всех представленных значений параметров | | | |

го поля E_z от координаты x/a для основной и второй мод. Видно, что электромагнитная волна основной моды сконцентрирована главным образом в ФДФ-структуре и вне ее убывает экспоненциально. Поэтому наличие боковых стенок не должно сильно влиять на постоянную распространения этой моды. Это утверждение подтверждается прямым расчетом, результаты которого приведены в табл. 2.

Как видно из данных табл. 2, при изменении ширины волновода a замедление

остается неизменным с точностью до трех знаков после запятой. Отсюда следует, что узкие стенки волновода можно «унести в бесконечность», т. е. вообще убрать. Можно убрать и широкие стенки, поскольку электрическое поле на них не имеет касательной составляющей и граничные условия не нарушаются. Мы получаем открытый волновод, в котором мы можем точно рассчитывать постоянную распространения основной моды. Структура поля нам известна в области между широкими стенка-

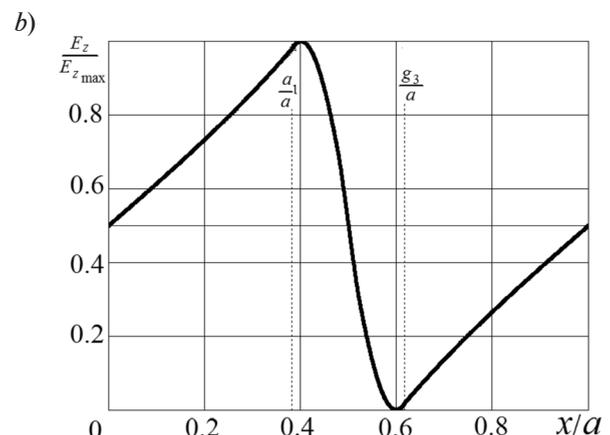
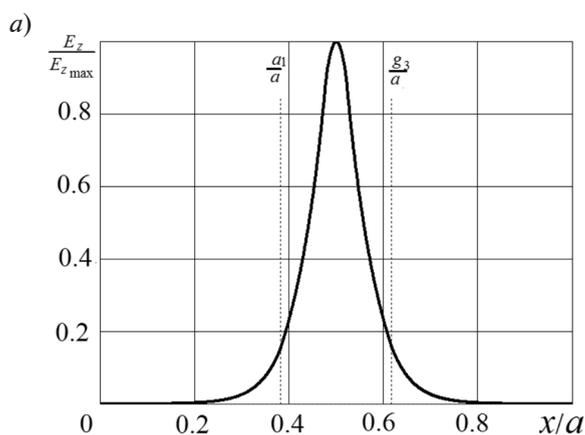


Рис. 5. Зависимости нормированной компоненты электрического поля E_z от нормированной координаты x для основной (а) и второй (б) мод.

Указанные геометрические параметры соответствуют представленным на рис. 1

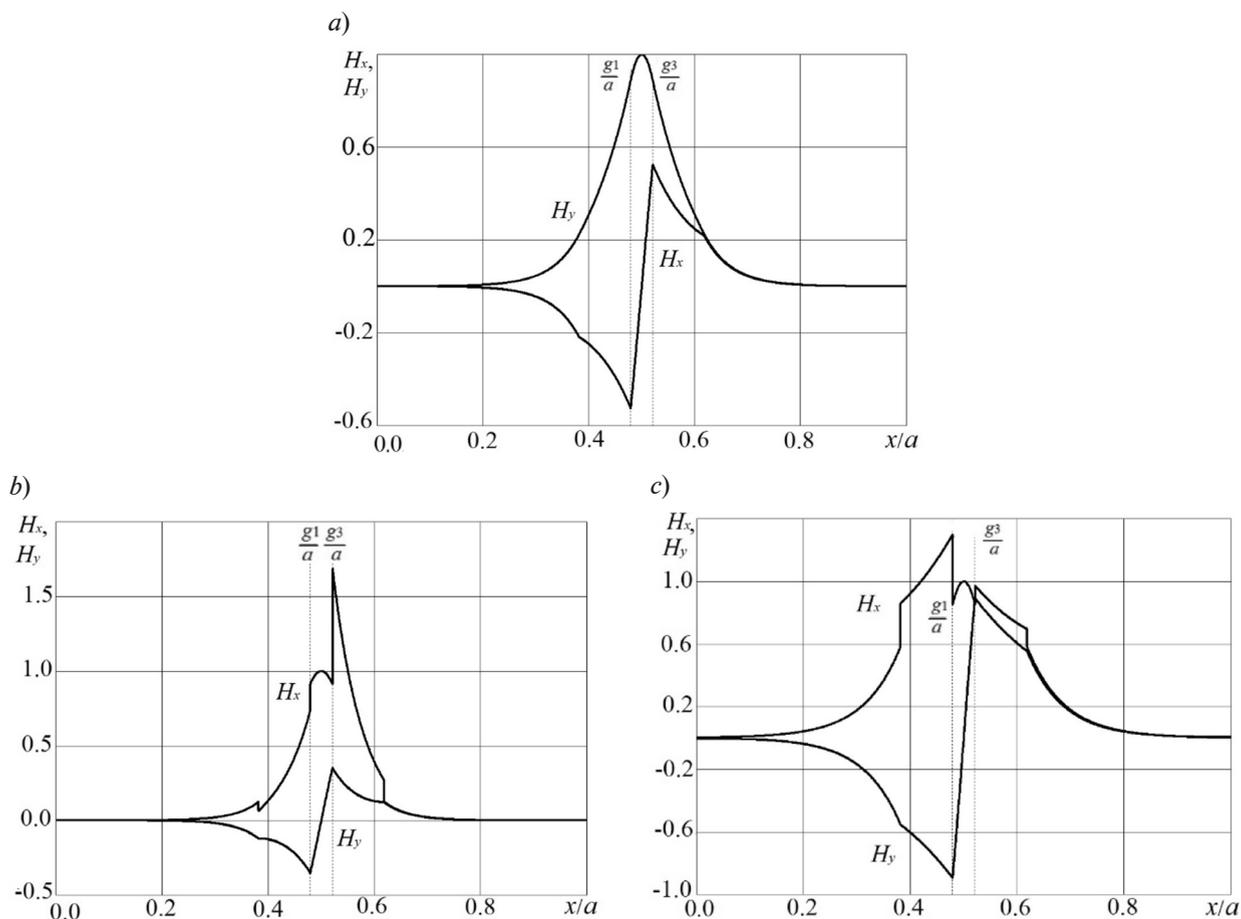


Рис. 6. Результаты расчета распределений магнитных полей (компоненты H_x , H_y) в ФДФ-структуре для ее размагниченого состояния (a) и для максимальных значений намагничивания (b, c); магнитная проницаемость $\mu_a = 0$ (a); $+0,5$ (b); $-0,5$ (c). Поля нормированы на величину $H_{y\max}$ при $\mu_a = 0$

ми. Вне таких широких стенок поле можно восстановить, так как на этих стенках известны касательные компоненты магнитного поля.

Таким образом, фактически решена задача расчета основной моды для открытой ФДФ-структуры.

Вторая мода существенно медленнее убывает вне ФДФ-структуры, поэтому для ее точного расчета надо брать бóльшую ширину волновода a .

На рис. 6 приведены графики структуры магнитных полей для размагниченого состояния ($\mu_a = 0$) и для максимальных значений намагничивания ($\mu_a = \pm 0,5$). Поля нормированы на величину $H_{y\max}$ при $\mu_a = 0$. Видно, что при $\mu_a = -0,5$ магнитные поля

в феррите больше, чем при $\mu_a = 0,5$. Кроме того, при $\mu_a = -0,5$ поляризация магнитного поля в ферритовых пластинах близка к круговой, в то время как при $\mu_a = 0,5$ поле в феррите, особенно в правой пластине, сильно отличается от поляризованной по кругу. Поэтому, как видно из графика на рис. 2, при отрицательных μ_a крутизна зависимости $q(\mu_a)$ выше.

Заключение

В работе строго решена задача о распространении волн в прямоугольном волноводе, содержащем трехслойную структуру феррит-диэлектрик-феррит. Предложенный подход позволяет исследовать моды электромагнитных колебаний, у которых отсут-



стует зависимость полей от координаты, направленной вдоль подмагничивающего поля. Показано, что полученные соотношения описывают и моды колебаний для открытого ФДФ-волновода. Именно основная мода колебаний в открытой ФДФ-структуре определяет главные свойства интегральных фазированных антенных решеток, такие как сектор сканирования и ширина диаграммы направленности. В результате применения предложенного подхода к исследованию

открытого ФДФ-волновода не требуется привлекать громоздкие численные методы, требующие много машинного времени. Тем самым расчет рабочих характеристик интегральных фазированных антенных решеток существенно упрощается.

Полученные результаты могут быть также использованы при создании ферритовых фазовращателей [9, 10] на базе закрытого прямоугольного волновода с трехслойной ФДФ-структурой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зайцев Э.Ф., Черепанов А.С., Гуськов А.Б. Новые электрически сканирующие антенны миллиметрового диапазона волн // Известия вузов России. Радиоэлектроника. 2003. № 4. С. 3–12.
2. Черепанов А.С., Гузенко К.В., Крутов И.А. Щелевая интегральная фазированная антенная решетка // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2012. № 2 (145). С. 41–45.
3. Зайцев Э.Ф., Черепанов А.С., Гуськов А.Б. Новые антенны миллиметрового диапазона волн с электрическим сканированием // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2001. № 2 (24). С. 47–52.
4. Гуревич А.Г. Ферриты на сверхвысоких частотах. М.: Физматгиз, 1960. 408 с.
5. Гуревич Г.А., Богомаз Н.А. Невзаимные фазовые сдвиги и коэффициент затухания в волноводе с ферритовой пластиной // Радиотехника и электроника. 1958. Т. 3. № 9. С. 1133–1143.

6. Зайцев Э.Ф., Черепанов А.С., Гуськов А.Б. Элементарная теория интегральных фазированных антенных решеток. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского государственного технического университета, 1999. Деп. в ВИНТИ, №3849–В99.
7. Шаров Г.А. Волноводные устройства сантиметровых и миллиметровых волн. М.: Научно-техническое издательство «Горячая линия – Телеком», 2016. 638 с.
8. Шаров Г.А. Основы теории сверхвысоко-частотных линий передачи, цепей и устройств. М.: Научно-техническое издательство «Горячая линия – Телеком», 2016. 470 с.
9. Катин С.В., Назаров А.В., Попов Е.А., Рожкова М.С. Электромагнитные волны в круглом открытом слоистом феррит-диэлектрическом волноводе // Антенны. 2012. № 8. С. 20–24.
10. Милевский Н.П., Треховицкий О.В. Некоторые вопросы управления ферритовым фазовращателем // Радиотехника. 2012. № 4. С. 84–92.

Статья поступила в редакцию 16.01.2018, принята к публикации 30.01.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЧЕРЕПАНОВ Андрей Сергеевич – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ASCherSPb@mail.ru

REFERENCES

- [1] E.F. Zaytsev, A.S. Cherepanov, A.B. Guskov, New electrically scanning antennas of millimeter wave range, Radioelectronics and Communication Systems. 46 (4) (2003) 3–12.
- [2] A.S. Cherepanov, K.V. Guzenko, I.A. Kroutov, The slot integrated phased array, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science, Telecommunications and Control Systems. No. 2 (145) (2012) 41–45.

- [3] E.F. Zaytsev, A.S. Cherepanov, A.B. Guskov, New millimeter-wave electrically scanned antennas, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. (2) (2001) 47–52.
- [4] A.G. Gurevich, Ferrity na sverkhvysokikh chastotakh [Microwave ferrite devices], Fizmatgiz, Moscow, 1960.
- [5] G.A. Gurevich, N.A. Bogomaz, Nonreciprocal phase shifts and a decay factor in the phase-plate-

loaded waveguide, J. Commun., Techn.& Electron. 3 (9) (1958) 1133 – 1343.

[6] **E.F. Zaytsev, A.S. Cherepanov, A.B. Guskov**, Elementarnaya teoriya integralnykh fazirovannykh antenykh reshetok [Elementary theory of integrated phase arrays], St. Petersburg State Technical University Publishing House, St. Petersburg, 1999. Dep. v VINITI, No. 3849–V99.

[7] **G.A. Sharov**, Volnovodnye ustrojstva santimetrovyh i millimetrovyh voln [Waveguide devices of centimeter and millimeter waves], Goryachaya Liniya Telekom, Moscow, 2016.

[8] **G.A. Sharov**. Osnovy teorii sverhvyso-kochastotnyh linij peredachi cepej i ustrojstv

[Foundations of the theory of microwave link communications for chains and devices], Goryachaya Liniya Telekom, Moscow, 2016.

[9] **S.V. Katin, A.V. Nazarov, E.A. Popov, M.S. Rozhkova**, Elektro-magnitnye volny v kruglom otkrytom sloistom ferrit-dielektricheskom volnovode [Electromagnetic waves in the circular open layed ferrite-dielectric waveguide], Antennas. (8) (2012) 20–24.

[10] **N.P. Milevskij, O.V. Trekhovickij**, Nekotorye voprosy upravleniya ferritovym fazovrashchatelem [Some aspects of a ferrite phase-shifter control], Radioengineering. (4) (2012) 84–92.

Received 16.01.2018, accepted 30.01.2018.

THE AUTHOR

CHEREPANOV Andrey S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

ASCherSPb@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.11114

УДК 530.12:517.988.38(075.8)

КВАНТОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ В ЗАМКНУТОЙ ВСЕЛЕННОЙ**Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко**Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Энергия замкнутой Вселенной представлена в виде разности двух положительно определенных величин, одна из которых включает энергию материи и энергию гравитационных волн на фоне расширяющейся Вселенной. Вторая величина связана с расширением Вселенной и названа энергией пространства. Суммарная энергия замкнутой Вселенной равна нулю в любой системе отсчета, если выполняются классические уравнения гравитационных связей. В квантовой теории сформулирован принцип минимума плотности энергии материи на пространстве состояний Вселенной при дополнительном условии, что гравитационные связи выполняются в среднем. Определяемые этим принципом состояния Вселенной отличаются степенью возбуждения материи и, согласно гравитационным связям, соответствующим возбуждением пространства. Состояние наименьшего возбуждения предложено рассматривать в качестве Начала Вселенной, а все множество решений – допустимыми физическими состояниями Вселенной в разные моменты космического времени.

Ключевые слова: энергия; время; расширяющаяся Вселенная; гравитационная связь; квантовое состояние; система отсчета

Ссылка при цитировании: Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С. Квантование плотности энергии в замкнутой Вселенной // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 147 – 156. DOI: 10.18721/JPM.11114

QUANTIZATION OF THE ENERGY DENSITY IN A CLOSED UNIVERSE**N.N. Gorobey, A.S. Lukyanenko**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

The energy of a closed universe is represented as a difference of two positive definite quantities, one of which includes the energy of matter and the energy of gravitational waves on the expanding universe background. The second quantity relates to the universe expansion and is called the energy of space. The whole energy of the universe equals zero provided the classical gravitational constraints are taken into account. In quantum theory a principle of the energy density of the matter minimum is formulated in the condition that the quantum gravitational constraints are also fulfilled in average. The states of the universe which satisfy the conditional minimal principle have different degree of the physical degrees of freedom excitation and, according to the gravitational constraints, corresponding excitation of space. The state of minimal excitation is proposed to be taken as the Beginning of the universe, and all the set of solutions, correspondingly, as admitted physical states of the universe at different moments of a cosmic time.

Keywords: energy; time; expanding universe; gravitational constant; quantum state; reference frame

Citation: N.N. Gorobey, A.S. Lukyanenko, Quantization of the energy density in a closed universe, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 147–156. DOI: 10.18721/JPM.11114

Введение

В основе современной квантовой космологии лежит уравнение Уиллера – де Витта (УдВ) [1, 2], которое можно записать в следующем сжатом виде:

$$\widehat{H}|\Psi\rangle = 0, \quad (1)$$

где \widehat{H} – гамильтониан Вселенной, заданный в произвольной системе отсчета.

В этой теории реализован ковариантный подход Дирака к квантованию динамических систем со связями [3], в котором физическое состояние системы определяется условиями равенства нулю квантовых связей. В результате квантовое состояние Вселенной не зависит от каких-либо параметров системы отсчета, в том числе от координатного времени (проблема времени в «замороженном» формализме квантовой теории гравитации [4, 5]). В таком случае параметр времени следует искать среди динамических переменных теории. Естественно в качестве таких переменных взять те, которые непосредственно связаны с расширением Вселенной, они заключены в ее масштабном факторе

$$\Omega(x) = [\det g_{ik}(x)]^{1/6},$$

где $g_{ik}(x)$, $i, k = 1, 2, 3$, – поле метрического тензора 3D-геометрии пространственного сечения Σ .

Такой выбор космического времени является основным при анализе решений уравнений Эйнштейна вблизи космологической сингулярности (где $\Omega(x) \rightarrow 0$) [6]. Ниже этому естественному выбору будет дано общее обоснование в рамках Гамильтонова формализма. Время тесно связано с энергией, и решение проблемы времени, следует думать, также связано с определением энергии в замкнутой Вселенной.

Уравнение (1) имеет вид стационарного уравнения Шредингера с нулевым собственным значением энергии. В данной работе равенство нулю энергии Вселенной

будет истолковано так, что положительная энергия материи, наполняющей Вселенную (сюда входит и энергия гравитационных волн), полностью компенсируется отрицательной энергией гравитационного поля, связанной с масштабным фактором, которая возникает в случае замкнутого пространства (100%-ый дефект массы). Прежде всего, энергия гравитационного поля в замкнутой Вселенной разделена на две части, имеющие противоположные знаки: часть энергии, которая включает энергию гравитационных волн на фоне расширяющейся Вселенной, и собственно энергия расширения пространства. Предлагаемый подход основан на теореме положительности энергии гравитационного поля, которая первоначально была сформулирована для островного распределения масс с асимптотически плоской геометрией пространства-времени [7, 8]. Гамильтонова формулировка этого результата вместе с новыми комплексными каноническими переменными общей теории относительности (ОТО) предложена в статье [9]. В работе [10] предложено обобщение этой теоремы на случай замкнутой Вселенной. Гамильтониан в этом случае имеет вид линейной комбинации связей ОТО H_μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$ (связи являются плотностями веса +1, их явный вид см. в монографии [11]):

$$H = \int_\Sigma d^3x N^\mu H_\mu. \quad (2)$$

Коэффициенты N^μ называются функциями следования и сдвига и определяют геометрию (3+1)-разбиения пространства-времени на пространство и время. Центральное место в этом рассмотрении занимает тождество Виттена [7, 8], в котором используются вспомогательные биспинорные поля на пространственном сечении Σ .

В случае асимптотически плоской геометрии пространства-времени вспомогательное спинорное поле – решение уравнения Дирака на пространственном сечении

входит непосредственно в выражение для энергии гравитационного поля. Оно не имеет физического смысла силового поля, а определяет не менее важный результат действия гравитационного поля – скорость хода времени в каждой точке пространственного сечения Σ [8]. В случае замкнутой Вселенной тождество Виттена дает искомого представление гамильтониана (2) в виде разности двух положительно определенных величин:

$$H = h - D^2, \quad (3)$$

одна из которых, h , совпадает по форме с положительной энергией гравитационного поля в асимптотически плоском пространстве-времени, а вторая, D^2 , связана с масштабным фактором $\Omega(x)$ и может быть названа энергией расширения пространства или просто энергией пространства. Представление (3) возникает при использовании специальной параметризации функций следования и сдвига N^μ составляющими биспинорного поля Дирака ψ на пространственном сечении Σ [12]. Теперь составляющие биспинора ψ определяют систему отсчета и соответствующую ей геометрию слоения пространства-времени, поэтому мы будем его называть калибровочным спинором. Оба слагаемых в выражении (3) являются квадратичными формами на пространстве биспинорных полей, в частности,

$$h = (\psi, \hat{h}\psi), \quad (4)$$

где круглыми скобками обозначено скалярное произведение в пространстве биспинорных полей.

При наличии полей материи, их энергия, пропорциональная тензору энергии-импульса, входит в квадратичную форму (4) также с положительным знаком [7]. Далее будем называть эту величину энергией материи. Согласно уравнениям связей,

$$H_\mu \approx 0, \quad (5)$$

гамильтониан (2) равен нулю, а значит и разность энергий материи и пространства в замкнутой Вселенной равна нулю.

Располагая понятием энергии материи в замкнутой Вселенной, значение которой

ограничено снизу, можно поставить задачу отыскания ее минимума в квантовой космологии. Эта задача сформулирована в работе [13], где соответствующее основное состояние предложено рассматривать в качестве Начала Вселенной. В данной работе принцип минимума (экстремума) энергии материи и вытекающие из него уравнения сформулируем как основу альтернативного УдВ (1) определения физических состояний Вселенной в квантовой космологии. В обычной квантовой механике стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{h}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (6)$$

возникает естественным образом в задаче на минимум (экстремум) среднего значения энергии (см., например, работу [14]):

$$\langle W \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{h} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (7)$$

на Гильбертовом пространстве состояний изолированной системы.

Сама эта задача имеет смысл постольку, поскольку оператор энергии \hat{h} ограничен снизу. Замкнутая Вселенная – это идеальная изолированная система, а согласно сформулированному выше утверждению, энергия материи в ней положительно определена. При квантовании квадратичная форма (4) превращается в оператор

$$\hat{h} = (\psi, \hat{h}\psi), \quad (8)$$

действующий в пространстве состояний вселенной $|\Psi\rangle$, где теперь двумя «шляпками» обозначен оператор, действующий в пространстве биспиноров ψ и одновременно в пространстве состояний Вселенной.

Таким образом, задача минимума (экстремума) должна быть сформулирована для функционала

$$\rho = \frac{\langle \Psi | (\psi, \hat{h}\psi) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | (\psi, \psi) | \Psi \rangle}. \quad (9)$$

Эта величина имеет размерность плотности энергии, поскольку в нормировочной квадратичной форме (ψ, ψ) в знаменателе предполагается интегрирование по объему Вселенной. Однако в формулировке этого принципа минимума возникнет затрудне-

ние, связанное с тем, что физические степени свободы материи (и гравитационных волн) взаимодействуют также с масштабным фактором $\Omega(x)$. Масштабный фактор определяет объем Вселенной, но из состава физических степеней свободы нами исключен. Указанное взаимодействие заключается в том, что оба слагаемых в правой части выражения (3) зависят от всех параметров 3D-геометрии.

Чтобы учесть эту зависимость, достаточно будет дополнить принцип минимума средней плотности энергии добавочными условиями, которые накладываются квантовыми связями на физические состояния Вселенной:

$$\langle \Psi | \widehat{H}_\mu | \Psi \rangle = 0. \quad (10)$$

Заметим, что к гравитационным связям (5) добавятся Гауссовы связи калибровочных теорий, которые лежат в основе стандартной модели материи [15], которые мы обозначим

$$G_a \approx 0, \quad (11)$$

где a – нумерующий индекс.

Это добавление произойдет автоматически, поскольку связи (11) содержатся в тензоре энергии-импульса полей материи. В результате приходим к условному принципу минимума (экстремума) среднего значения энергии материи в замкнутой Вселенной для функционала

$$\frac{\langle \Psi | (\psi, \widehat{h}\psi) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | (\psi, \psi) | \Psi \rangle} + \int_\Sigma \sqrt{g} d^3x [l^\mu \langle \Psi | \widehat{H}_\mu | \Psi \rangle + A^a \langle \Psi | D_a | \Psi \rangle], \quad (12)$$

где $l_\mu(x)$, $A^a(x)$ – множители Лагранжа.

В следующем разделе даны необходимые определения и явный вид представления (3) гамильтониана замкнутой Вселенной. Из тождества Виттена выведено операторное представление гравитационных связей и дано обоснование выбора масштабного фактора Вселенной в качестве внутреннего (многострелочного) параметра времени в расширяющейся Вселенной. Затем из условного принципа минимума (12) получим систему уравнений, среди которых

будет искомое «стационарное» уравнение Шредингера.

Гамильтониан замкнутой Вселенной

Введем спинорные переменные, которые присутствуют в тождестве Виттена и доказательстве теоремы положительности энергии гравитационного поля [7, 8]. Спинорное поле – это пара комплексных чисел $\lambda_A \in C^2$, $A = 0, 1$, заданных в каждой точке пространственного сечения Σ , имеющие определенные трансформационные свойства при преобразованиях пространственных координат (необходимые определения и обозначения алгебры спиноров содержатся в работе [15]). При использовании спинорных переменных удобно также использовать для описания гравитационного поля комплексные канонические переменные (σ_{iAB}, M^{kCD}) , определяемые соотношениями

$$\sigma_{iAB} \sigma_k^{AB} = g_{ik}, \quad \sigma_{iAB} \sigma^{iCD} = \varepsilon_{(A}^C \varepsilon_{B)}^D, \quad (13)$$

$$M^{kCD} \equiv \pi^{kl} \sigma_l^{CD}, \quad (14)$$

а также условием эрмитовости спиновых коэффициентов метрики:

$$\sigma_{iAB}^+ \equiv 2n_A^C n_B^{D'} \bar{\sigma}_{iC'D'} = -\sigma_{iAB}, \quad (15)$$

где $\pi^{lm}(x)$, $l, m = 1, 2, 3$, – канонические импульсы, сопряженные 3D метрическому тензору (они являются тензорной плотностью веса +1); вместе с $g_k(x)$ они образуют вещественные канонические переменные гравитационного поля Арновитта – Дезера – Мизнера (АДМ) (см. работу [11]). Верхней чертой обозначена операция комплексного сопряжения.

Спин-тензоры и n^{AB} , определяемые соотношениями $\varepsilon_{AB} = -\varepsilon_{BA}$, $\varepsilon_{01} = 1$ и

$$n^{AA'} n^B_{A'} = \frac{1}{2} \varepsilon^{AB}, \quad (16)$$

представляют собой, соответственно, метрический тензор и произвольный унитарный спин-тензор в пространстве спиноров C^2 . Спинорные индексы поднимаются и опускаются с помощью ε_{AB} и приобретают штрих при операции комплексного сопряжения спинора (два штриха аннигилируют).

Из всех канонических скобок Пуассо-

на (СП) для новых переменных, выделим только одно СП-соотношение, относящееся к масштабному фактору Ω Вселенной:

$$\{\ln \Omega^2(x), M(y)\} = \delta^3(x - y), \quad (17)$$

где $M \equiv M^{kCD} \sigma_{kCD}$.

Масштабный фактор определяет 3D-объем Вселенной:

$$V = \int_{\Sigma} \Omega^3 d^3x. \quad (18)$$

Введем в пространстве спинорных полей комплексную связность [17]:

$$A_{kMN} = \Gamma_{kMN}(\sigma) + \frac{i}{\sqrt{2g}} M_{kMN}, \quad (19)$$

где $\Gamma_{IMN}(\sigma)$ – обычная спиновая связность без кручения, которая подчиняется условию эрмитовости вида (15).

Она определяет ковариантную производную

$$\nabla_k \lambda_A \equiv \partial_k \lambda_A + A_{kA}{}^B \lambda_B \quad (20)$$

в пространстве спинорных полей.

Нам потребуются также биспиноры Дирака

$$\psi \in C^2 \otimes \bar{C}^2.$$

На пространстве биспинорных полей определим 3D-оператор Дирака

$$\widehat{D}\psi \equiv i\sqrt{2} \begin{pmatrix} n_A{}^{B'} \sigma^k{}_{B'}{}^C \nabla_k \lambda_C \\ n_{A'}{}^B \bar{\sigma}^k{}_{B'}{}^C \bar{\nabla}_k \mu_{C'} \end{pmatrix}, \quad \psi = \begin{pmatrix} \lambda_A \\ \mu_{A'} \end{pmatrix} \quad (21)$$

и введем эрмитово скалярное произведение

$$(\psi_1, \psi_2) \equiv \int_{\Sigma} \sqrt{g} d^3x n_{AA'} (\bar{\lambda}_1{}^{A'} \lambda_2{}^A + \mu_1{}^A \bar{\mu}_2{}^{A'}). \quad (22)$$

Оператор Дирака (21) является эрмитовым относительно этого скалярного произведения [12].

Тождество Виттена связывает билинейную форму квадрата оператора Дирака \widehat{D}^2 с билинейной формой другого положительно определенного оператора, который (с небольшой модификацией) и будет искомым представлением энергии материи в замкнутой Вселенной.

Пользуясь принятыми здесь обозначениями и опуская для простоты вклад полей материи, это тождество мы можем записать в виде [12]:

$$(\psi_1, \widehat{D}^2 \psi_2) - (\psi_1, \widehat{w}\psi_2) = H[\psi_1, \psi_2], \quad (23)$$

где

$$(\psi_1, \widehat{w}\psi_2) \equiv \frac{1}{4} \int_{\Sigma} \sqrt{g} d^3x g^{ik} n_{AA'} \times \\ \times (\bar{\nabla}_i \bar{\lambda}_1{}^{A'} \nabla_k \lambda_2{}^A + \nabla_i \mu_1{}^A \bar{\nabla}_k \bar{\mu}_2{}^{A'}), \quad (24)$$

а билинейная форма справа есть линейная комбинация гравитационных связей.

В случае асимптотически плоской геометрии пространства-времени тождество Виттена позволяет выразить энергию островной системы, которая определяется поверхностным интегралом на пространственной бесконечности, через положительно определенную квадратичную форму, которая получается из выражения (24) при $\psi_1 = \psi_2 = \psi$, где биспинор ψ является решением уравнения Дирака

$$\widehat{D}\psi = 0 \quad (25)$$

с заданным асимптотическим значением ψ_0 .

Заметим, что появление вспомогательной спинорной переменной в ОТО, которая подчиняется дифференциальному уравнению (25), в дополнение к уже имеющимся полям материи, для самого Виттена оказалось сюрпризом [7]. При этом биспинор ψ , как было указано, задает локальные свойства глобально-инерциальной системы отсчета, в которой определена энергия.

В случае замкнутой Вселенной, поверхностный интеграл и обычное определение энергии отсутствуют и физические следствия тождества (23) будут несколько иными. Возьмем теперь произвольное биспинорное поле $\psi \neq 0$ на пространственном сечении Σ и, полагая $\psi_1 = \psi_2 = \psi$ в тождестве (23), запишем представление гамильтониана замкнутой Вселенной (в системе отсчета, определяемой ψ) в виде разности двух положительно определенных квадратичных форм:

$$H[\psi] = (\psi, \widehat{w}\psi) - (\psi, \widehat{D}^2 \psi). \quad (26)$$

Здесь гамильтониан $H[\psi]$ задан в калибровке [11]:

$$N^0 = \frac{1}{4\sqrt{2}} n_{AA'} (\lambda^A \bar{\lambda}^{A'} + \mu^A \bar{\mu}^{A'}), \quad (27)$$

$$N^k = -\frac{1}{4} \sigma^k_{AB} n^B_{A'} (\lambda^A \bar{\lambda}^{A'} + \mu^A \bar{\mu}^{A'}). \quad (28)$$

Тем самым представление (3) доказано. Будучи квадратичным относительно канонических импульсов материи и геометрии пространства-времени, гамильтониан замкнутой Вселенной продуцирует также геометрию конфигурационного пространства ОТО (суперпространства). Из представления гамильтониана (26) видно, что эта геометрия является псевдоримановой в любой системе отсчета.

Теперь предложим физическую трактовку обоих слагаемых в правой части (26). Первое слагаемое отлично от нуля при любом ψ , поскольку оператор Дирака (21) является оператором эллиптического типа на компактном многообразии Σ , так что его спектр дискретен и отделен от нуля. Обратим внимание, что этот оператор содержит только импульс $M \equiv M^{kCD} \sigma_{kCD}$, который, согласно соотношению (17), канонически сопряжен масштабному фактору 3D-геометрии (точнее, величине $\ln(\Omega^2)$). По этой причине данный вклад в гамильтониан мы будем называть энергией расширения 3D-пространства Вселенной. Однако импульс M , пропорциональный Ω и определяющий кинетическую энергию расширения пространства, содержится также во второй квадратичной форме гамильтониана (26). Его вклад можно оттуда «извлечь» ковариантным образом, если ввести полностью симметричные спин-тензоры [12]:

$$\varphi^{MNA} \equiv \sigma^{iMN} \nabla_i \lambda^A + \frac{2}{3} \varepsilon^{A\{M} \sigma^{iN\} P} \nabla_i \lambda^P, \quad (29)$$

$$\chi^{MNA} \equiv \sigma^{iMN} \nabla_i \mu^A + \frac{2}{3} \varepsilon^{A\{M} \sigma^{iN\} P} \nabla_i \mu^P. \quad (30)$$

Эти спин-тензоры, как нетрудно проверить, не содержат канонического импульса M . Теперь представление гамильтониана замкнутой Вселенной принимает следующий окончательно вид:

$$h[\psi] - \frac{11}{9} (\psi, \widehat{D}^2 \psi) = H[\psi], \quad (31)$$

где

$$h[\psi] \equiv (\psi, \widehat{h}\psi) = \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \sqrt{g} d^3 x n_{AA'} n_{MM'} n_{NN'} \times \quad (32)$$

$$\times (\varphi^{A'M'N'} \varphi^{AMN} + \chi^{A'M'N'} \chi^{AMN}) + (\psi, \widehat{T}\psi). \quad (32)$$

Здесь «шляпками» обозначены операторы, действующие в пространстве биспинорных полей.

Мы добавили в это выражение для энергии гравитационного поля вклад обычной материи, пропорциональный соответствующему тензору энергии-импульса [7], и все вместе будем трактовать как энергию физических степеней свободы в замкнутой Вселенной. При этом первое слагаемое в равенстве (32) представляет ту часть энергии гравитационного поля, которая включает энергию гравитационных волн на фоне расширяющейся Вселенной.

Заметим, что это выражение для энергии в замкнутой Вселенной совпадает с тем, которое получено для островного распределения масс с асимптотически плоской геометрией пространства-времени, поскольку в этом случае биспинор ψ подчиняется уравнению Дирака (25). Это видно из операторной формы равенства (32):

$$\widehat{h} = -\frac{1}{2} \Delta + \frac{2}{9} \widehat{D}^2 + \widehat{T}, \quad (33)$$

где

$$\Delta \psi \equiv \frac{1}{\sqrt{g}} \begin{pmatrix} n_A{}^{A'} \bar{\nabla}_i (\sqrt{g} g^{ik} n_{A'}{}^B \nabla_k \lambda_B) \\ n_{A'}{}^A \nabla_i (\sqrt{g} g^{ik} n_A{}^{B'} \bar{\nabla}_k \bar{\mu}_{B'}) \end{pmatrix} \quad (34)$$

– оператор Бельтрами – Лапласа в пространстве биспинорных полей.

Первое слагаемое в правой части равенства (33), как и все это выражение, является положительно определенным оператором и представляет собой оператор энергии гравитационного поля в случае асимптотически плоской геометрии пространства-времени.

Само тождество Виттена (23), справедливое для любых ψ_1, ψ_2 , ведет к операторному равенству на пространстве биспинорных полей, а именно

$$\widehat{h} - \frac{11}{9} \widehat{D}^2 = 0, \quad (35)$$

если выполнены гравитационные связи (5).

Равенство (35) можно явно решить относительно оператора Дирака:

$$\widehat{D} = \pm \sqrt{\frac{9}{11}} \widehat{h}, \quad (36)$$

где квадратный корень из положительно определенного эрмитова оператора (33) может быть определен также как эрмитов оператор.

Здесь операторы действуют в пространстве биспинорных полей. Поскольку оператор Дирака линеен относительно M , приходим к выводу, что система гравитационных связей решена относительно канонических импульсов, сопряженных динамической переменной $\ln(\Omega^2(x))$.

Это представление гравитационных связей может быть положено в основу нековариантной формы квантовой гравитации с классическим «многострелочным» временем [10], роль которого естественным образом играет переменная $\ln(\Omega^2(x))$ (в каждой точке x пространственного сечения Σ существует своя стрела времени).

Однако операторное уравнение (36) само по себе не описывает эволюции Вселенной, пока не фиксирован конкретный наблюдатель. В квантовой теории это уравнение принимает форму нестационарного уравнения Шрёдингера с единым космическим параметром времени лишь в проекции на произвольный калибровочный спинор $\psi(x)$:

$$(\psi, \widehat{D}\psi) = \pm \left(\psi, \sqrt{\frac{9}{11}} \widehat{h}\psi \right). \quad (37)$$

Это есть явное нарушение ковариантности, поскольку калибровочный спинор фиксируется произвольным образом. В следующем разделе предложен альтернативный вариант описания квантовой динамики Вселенной без явного нарушения ковариантности. Вместо извлечения квадратного корня в операторном уравнении (35) и введения классического параметра времени, связанного с масштабным фактором $\Omega(x)$ и «спроектированного» на произвольный калибровочный спинор $\psi(x)$, сформулируем квантовую теорию, основанную на принципе минимума (экстремума) энергии материи (12), в которой масштабный фактор квантуется наравне с остальными составляющими 3D-метрики.

Квантование плотности энергии в замкнутой Вселенной

Квантование осуществим стандартным образом – заменой канонических импульсов p операторами вариационного дифференцирования на пространстве состояний Вселенной $|\Psi\rangle$:

$$p(x) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta q(x)}, \quad (38)$$

где $q(x) \equiv (\sigma_{iAB}(x), \phi(x))$ ($\phi(x)$ – набор полей материи).

Соответственно, операторами в этом пространстве состояний становятся гамильтониан материи \widehat{h} , определяемый подстановкой операторов (38) в гамильтониан (31) и выражение (32), и гравитационные связи \widehat{H}_μ . Заметим, что Гауссовы связи (11) с соответствующими множителями Лагранжа уже содержатся во втором слагаемом оператора (32). На этом этапе возникнет затруднение в определении этих операторов, связанное с неоднозначностью упорядочения некоммутирующих операторных множителей. Мы здесь считаем это затруднение техническим и не будем в него углубляться.

После того как определены основные величины, остается выписать уравнения, которые вытекают из условного принципа экстремума (12). Вариационными параметрами являются: волновая функция Вселенной $\Psi[\sigma, \phi]$, калибровочный биспинор $\psi(x)$ и множители Лагранжа $l_\mu(x), A^a(x)$.

Вариация по $|\Psi\rangle$ дает собственно стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\frac{(\psi, \widehat{h}\psi)}{(\psi, \psi)} |\Psi\rangle + \int_\Sigma \sqrt{g} d^3x [\tilde{l}^\mu \widehat{H}_\mu |\Psi\rangle + \tilde{A}^a D_a |\Psi\rangle] = \rho |\Psi\rangle, \quad (39)$$

где среднее значение двойного оператора энергии \widehat{h} вычисляется в системе отсчета, определяемой калибровочным спинором $\psi(x)$. Оно остается оператором в пространстве состояний Вселенной $|\Psi\rangle$.

Модифицированные множители Лагранжа $\tilde{l}_\mu(x), \tilde{A}^a(x)$ отличаются от исходных нормировочным множителем

$$\frac{\langle \Psi | (\psi, \psi) | \Psi \rangle}{(\psi, \psi)}. \quad (40)$$

Вариация по $\psi(x)$ дает уравнение для калибровочного спинора:

$$\frac{\langle \Psi | \hat{h} \Omega^3(x) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Omega^3(x) | \Psi \rangle} \psi = \rho \psi, \quad (41)$$

где среднее значение \hat{h} вычисляется в пространстве состояний Вселенной с весом $\Omega^3(x)$ и является оператором в пространстве биспинорных полей на Σ .

Таким образом, распределение энергии материи, определяемое оператором \hat{h} , фиксирует систему отсчета, соответствующую данному состоянию Вселенной. Наконец, вариация по множителям Лагранжа l_μ, A_0^a дает уравнения связей (10) плюс дополнительные калибровочные связи

$$\langle \Psi | G_a | \Psi \rangle = 0. \quad (42)$$

Уравнений связей достаточно для определения множителей Лагранжа в равенстве (35), после чего самосогласованная система уравнений (39) и (41) образует «стационарное» уравнение Шрёдингера в квантовой космологии.

Обратим внимание, что при фиксированном $|\Psi\rangle$ оператор, действующий на $\psi(x)$ в левой части равенства (41), так же как и \hat{D}_2 , является эллиптическим на компактном многообразии Σ . Его спектр дискретен. Можно предположить, что и спектр собственных значений ρ в этой задаче дискретен, с учетом того, что $|\Psi\rangle$ и $\psi(x)$ находятся самосогласованно.

Таким образом, параметр ρ , который входит в уравнения (39) и (41), нумеруется некоторым набором квантовых чисел. В классической космологии плотность энергии материи в расширяющейся Вселенной уменьшается с течением космического времени, начиная от бесконечного значения. В рассматриваемой здесь квантовой теории решения «стационарного» уравнения Шрёдингера отличаются степенью возбуждения физических степеней свободы материи. Среди них существует состояние минимального возбуждения, которое в работе [13] названо основным состоянием Вселен-

ной в квантовой космологии, и оно предложено там в качестве Начала Вселенной. В этом состоянии плотность энергии материи является максимальной, но конечной.

Теперь возникает необходимость в интерпретации всего набора решений «стационарного» уравнения Шрёдингера. Основное предположение, которое мы делаем относительно спектра допустимых значений ρ , состоит в том, что они и реализуются в квантовой эволюции Вселенной. Это означает, что космическое время следует искать в упомянутом выше наборе квантовых чисел. В этой картине квантовой эволюции Вселенной параметр времени дискретен. Непрерывный характер эволюции с непрерывным временем следует ожидать, как обычно, при больших степенях возбуждения энергии материи. Еще одним элементом формализма является дополнительное поле калибровочного спинора $\psi(x)$, который определяет локальные свойства системы отсчета, сопутствующей распределению материи в данный момент космического времени. Построенная из него функция следования $N^0(x)$, согласно калибровке (27), задает скорость хода стандартных часов, помещенных в каждую точку пространства. Таким образом, вместе с космическим временем фиксируется также система отсчета, к которой это время должно быть отнесено. Здесь нет нарушения ковариантности, поскольку параметры системы отсчета определяются самосогласованно с самим распределением материи в данном квантовом состоянии. Однако последовательное развитие этой интерпретации предполагает знание структуры квантового спектра плотности энергии.

Заключение

В данной работе предложено рассмотреть квантовую эволюцию Вселенной в терминах энергетического параметра — средней плотности энергии материи. Основанием нового подхода служит то, что динамическая структура общей теории относительности в случае замкнутой Вселенной допускает определение понятий энергии материи (включая гравитационные волны) и энергии расширения пространства. В любой системе отсчета, задаваемой калибровочным

спинором ψ , эти величины являются некоопределенными квадратичными формами ψ , которые взаимно сокращаются, если выполнены гравитационные связи.

Таким образом, получает обоснование представление о замкнутой Вселенной как об объекте со 100%-м дефектом массы-энергии. В таком случае квантование теории может быть основано на принципе минимума энергии в применении к одной части внутренней энергии Вселенной, а именно – к энергии материи и гравитационных волн.

В результате получена система уравнений, которая для замкнутой Вселенной служит аналогом стационарного уравнения Шредингера в обычной квантовой механике. Система включает уравнение (39), решения которого суть состояния Вселенной $|\Psi\rangle$ с определенным значением средней плотности энергии ρ . Его дополняет уравнение (41) для калибровочного спинора ψ , т. е. системы отсчета, к которой должно быть отнесено физическое состояние $|\Psi\rangle$, а параметром квантования служит значение средней плотности энергии ρ . Уравнения квантовых свя-

зей (10) и (42) фиксируют неопределенные множители Лагранжа в уравнении Шредингера (39). В этом формализме нет нарушения ковариантности, поскольку не требуется дополнительных калибровочных условий для фиксации множителей Лагранжа. В отличие от обычной ковариантной формы квантовой теории, основанной на уравнениях Уиллера – де Витта (1), здесь имеются наблюдаемые параметры ρ и $\psi(x)$, которые вместе могут быть связаны с космическим временем и системой отсчета в квантовой космологии. Космическое время в этом формализме является дискретным. Непрерывную эволюцию Вселенной следует ожидать лишь на поздних стадиях, соответствующих высокой степени возбуждения энергии материи.

Благодарности

Авторы благодарят доктора физико-математических наук, профессора В.А. Франке (Санкт-Петербургский государственный университет) и доктора физико-математических наук А.В. Гольцева за полезные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wheeler J. Superspace and the nature of quantum geometrodynamics // С. DeWitt, J. Wheeler (eds). "Batellerencontres – 1967. Lectures in mathematics and physics". New York: W.A. Benjamin, Inc., 1968. Pp. 242–307.
2. DeWitt C. The quantization of geometry // L. Witten(ed.). "Gravitation: an introduction to current research". New York: Wiley, 1962.
3. Dirac P.A.M. The principles of quantum mechanics. 4th ed. Oxford: Oxford Univ. Press, 1958. Pp. 35–36.
4. Isham C.J. Canonical quantum gravity and the problem of time // arXiv:gr-qc/9210011v1, 1992.
5. Anderson E. Problem of time in quantum gravity // arXiv:1206.2403v1 [gr-qc], 2012.
6. Халатников И.М., Каменщик А.Ю. Лев Ландау и проблема сингулярностей в космологии // УФН. 2008. Т. 178. № 6. С. 639–647.
7. Witten E. A new proof of the positive energy theorem // Commun. Math. Phys. 1981. Vol. 80. No. 3. Pp. 381–402.
8. Фаддеев Л.Д. Проблема энергии в теории тяготения Эйнштейна // УФН. 1982. Т. 136. № 3. С. 435–457.
9. Ashtekar A. On the Hamiltonian of General Relativity // Physica. A. 1984. Vol. 124. No. 1–3. Pp. 51–59.
10. Лукьяненко А.С. Продольные гравитационные поля в общей теории относительности // Доклады АН СССР. 1986. Т. 289. № 3. С. 579–583.
11. Misner C., Thorne K. Wheeler J. Gravitation. San Francisco: W.H. Freeman and Company, 1973. 1279 p.
12. Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. Three-dimensional volume of a closed universe as a canonical time parameter // Class. Quantum Grav. 1993. Vol. 10. No. 11. Pp. 2329–2335.
13. Gorobey N., Lukyanenko A. Ground state of the universe in quantum cosmology // J. Mod. Phys. A. 2016. Vol. 31. No. 02n03. P. 1641014.
14. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
15. Фаддеев Л.Д., Славнов А.А. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М.: Наука, 1988. 240 с.
16. Пенроуз Р., Риндлер В. Спиноры и пространство-время. В 2 тт. Т. 1. Спиноры и пространство-время. М.: Мир, 1987. 527 с.
17. Ashtekar A. New Hamiltonian formulation of General Relativity // Phys. Rev. D. 1987. Vol. D 36. No. 6. Pp. 1587–1602.

Статья поступила в редакцию 23.09.2017, принята к публикации 28.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОБЕЙ Наталья Николаевна — доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.gorobey@mail.ru

ЛУКЪЯНЕНКО Александр Сергеевич — доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alex.lukyan@rambler.ru

REFERENCES

- [1] **J. Wheeler**, Superspace and the nature of quantum geometrodynamics, In: C. DeWitt, J. Wheeler (eds), “Batelle Rencontres – 1967, Lectures in Mathematics and Physics”, Benjamin Inc., New York (1968) 242–307.
- [2] **C. DeWitt**, The quantization of geometry, In: L. Witten (ed.), “Gravitation: An Introduction to Current Research”, Wiley, New York 1962.
- [3] **P.A.M. Dirac**, The principles of quantum mechanics, 4th ed., Oxford Univ. Press, Oxford (1958) 35–36.
- [4] **C.J. Isham**, Canonical quantum gravity and the problem of time, arXiv:gr-qc/9210011v1, 1992.
- [5] **E. Anderson**, Problem of time in quantum gravity, arXiv:1206.2403v1 [gr-qc], 2012.
- [6] **I.M. Khalatnikov, A.Yu. Kamenshchik**, Lev Landau and the problem of singularities in cosmology, Sov. Phys. Usp. 51 (6) (2008) 609–616.
- [7] **E. Witten**, A new proof of the positive energy theorem, Commun. Math. Phys. 80 (3) (1981) 381–402.
- [8] **L.D. Faddeev**, The energy problem in Einstein’s theory, Sov. Phys. Usp. 25(3) (1982) 130–142.
- [9] **A. Ashtekar**, On the Hamiltonian of General Relativity, Physica. A. 124 (1–3) (1984) 51–59.
- [10] **A. Lukyanenko**, Lengthwise gravitation fields in General Relativity theory, Doklady Akademii Nauk SSSR. 289 (3) (1986) 579–583.
- [11] **C. Misner, K. Thorne, J. Wheeler**, Gravitation, W.H. Freeman and Company, San Francisco, 1973.
- [12] **N.N. Gorobey, A.S. Lukyanenko**, Three-dimensional volume of a closed universe as a canonical time parameter, Class. Quantum Grav. 10(11) (1993) 2329–2335.
- [13] **N. Gorobey, A. Lukyanenko**, Ground state of the universe in quantum cosmology, J. Mod. Phys. A. 31 (02n03) (2016) 1641014.
- [14] **V.A. Fock**, Nachala kvantovoy mekhaniki [Quantum mechanics principles], Nauka, Moscow, 1976.
- [15] **L.D. Faddeev, A.A. Slavnov**, Vvedeniye v kvantovuyu teoriyu kalibrovochnykh poley [An introduction to gauge field quantum theory], Nauka, Moscow, 1988.
- [16] **R. Penrose, W. Rindler**, Spinors and space-time, Vol. 1. Two-spinor calculus and relativistic fields, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1984.
- [17] **A. Ashtekar**, New Hamiltonian formulation of General Relativity, Phys. Rev. D. D 36 (6) (1987) 1587–1602.

Received 23.09.2017, accepted 28.11.2017.

THE AUTHORS

GOROBEY Nataliya N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
n.gorobey@mail.ru

LUKYANENKO Alexander S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alex.lukyan@rambler.ru

DOI: 10.18721/JPM.111115

УДК 539.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНТАКТНОЙ СИЛЫ ОСЕВОГО СОУДАРЕНИЯ УПРУГОГО СТЕРЖНЯ И НЕДЕФОРМИРУЕМОГО УДАРНИКА

А.К. Беляев^{1,2,3}, А.О. Шурпатов², Ч.-Ч. Ма⁴

¹Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

³Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

⁴Национальный университет Тайваня, г. Тайбэй, Тайвань

Рассматривается задача об осевом соударении упругого стержня и абсолютно твердого ударника. Для решения данной задачи применен полуаналитический метод и метод конечных элементов. Решение полуаналитическим методом основано на применении теории Герца квазистатического контакта и численного интегрирования дифференциальных уравнений динамики. В рамках применения метода конечных элементов определено необходимое число степеней свободы и выполнено численное моделирование. Найдено время контактного взаимодействия, а также получена зависимость контактной силы от времени контакта. Проведено исследование волновых процессов, возникающих в стержне. Выполнено сравнение полученных результатов с данными натурных экспериментов. Выявлена обратная зависимость между массой ударника и погрешностями обоих методов. Сравнение с натурным экспериментом подтверждает применимость обоих методов к решению данной задачи.

Ключевые слова: осевое соударение; контактная сила; метод конечных элементов

Ссылка при цитировании: Беляев А.К., Шурпатов А.О., Ма Ч.-Ч. Определение контактной силы осевого соударения упругого стержня и недеформируемого ударника // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 1. С. 157 – 166. DOI: 10.18721/JPM.111115

DETERMINING THE CONTACT FORCE OF AN AXIAL COLLISION OF AN ELASTIC ROD WITH A RIGID IMPACTOR

A.K. Belyaev^{1,2,3}, A.O. Shurpatov², Ch.-Ch. Ma⁴

¹Institute for Problems of Mechanical Engineering of RAS, St. Petersburg, Russian Federation;

²Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

³St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russian Federation;

⁴National Taiwan University, Taipei, Taiwan

The problem of axial impact of a rigid body on elastic rod is considered. The Semi-Analytical Method (SEM) and Finite Element Method (FEM) are applied to

handle the problem. The SEM of solving the problem implies the quasi-static Hertz theory and numerical integration of obtained differential equations. The number of necessary degrees of freedom of the FEM solution is determined and numerical simulation is carried out. The time of contact interaction and dependence of the contact force on the contact time are calculated. The longitudinal wave propagation in the rod is investigated. The obtained results are compared with the data from natural experiments. An inverse dependence between impacting mass and the accuracy of both methods is discussed. The results of comparison confirm the appropriateness of both methods for solving the problem.

Key words: axial collision; contact force; finite element method

Citation: A.K. Belyaev, A.O. Shurpatov, Ch.-Ch. Ma, Determining the contact force of an axial collision of an elastic rod with a rigid impactor, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (1) (2018) 157 – 166. DOI: 10.18721/JPM.11115

Введение

Задачи динамики и устойчивости тонких стержней при продольном ударе стержня требуют знания формы и амплитуды силы в зоне контакта [1–3]. Данная работа посвящена определению контактной силы при осевом соударении стержня и ударника с помощью трех принципиально разных подходов: полуаналитического метода (математическое моделирование), метода конечных элементов и эксперимента. Отдельный интерес представляет сравнение результатов, полученных в рамках данных подходов, которое позволяет судить о корректности каждого подхода и возможности их дальнейшего применения.

Постановка задачи

Рассматривается упругий стержень длиной l , на одном из концов которого выполняется условие заделки (для всех точек сечения запрещены перемещения и повороты). К свободному концу стержня в начальный момент времени со скоростью V_0 подлетает ударник массой m , в результате чего в системе возникает контактное взаи-

модействие (рис. 1). Силы тяжести стержня и ударника во внимание не принимаются.

В общем случае сила упругого контактного взаимодействия возникает в результате взаимных колебаний сталкивающихся тел и может быть определена из анализа их совместных динамических деформаций.

Целями исследования являются нахождение времени контактного взаимодействия стержня и ударника, построение зависимости возникающей контактной силы от времени и экспериментальная верификация расчетов.

Полуаналитический метод

Описание математической модели. Условием контакта тел является совпадение координат точек их контакта [4]:

$$v_0 t - \alpha - y_1 - y_2 = 0,$$

где α – линейное сближение тел за счет контактных деформаций; y_1, y_2 – динамические перемещения точек контакта обоих тел, вызванные контактной силой $P(t)$ без учета местных деформаций; v_0 – начальная скорость ударника.

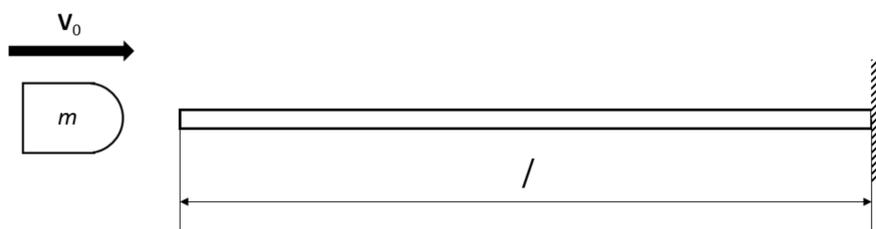


Рис. 1. Схема к постановке задачи (общий случай): l – длина упругого стержня; m – масса недеформируемого ударника, V_0 – вектор его начальной скорости

Ввиду малости контактной зоны мы пренебрегаем ее массой. Тогда мы получаем право воспользоваться квазистатической контактной теорией Герца, согласно которой контактная сила P связана с величиной α следующей зависимостью [5]:

$$P(\alpha) = k\alpha^{3/2},$$

где k – коэффициент, зависящий от параметров контактирующих тел.

В случае рассматриваемой модели он имеет вид [6]:

$$k = \frac{2}{3(1 - \mu^2)} E\sqrt{R},$$

где E , μ – модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно (предполагается одинаковый материал для стержня и ударника); R – радиус сферического профиля ударника.

Перемещения y_1 и y_2 можно выразить через контактную силу, используя реакцию каждого из соударяющихся тел на единственный импульс [7]:

$$y_1 = \int_0^t P(\theta)Y^{(1)}(t - \theta)d\theta,$$

$$y_2 = \int_0^t P(\theta)Y^{(2)}(t - \theta)d\theta,$$

где $Y^{(1)}$, $Y^{(2)}$ – реакции на единственный импульс стержня и ударника соответственно; t – текущее время, θ – переменная интегрирования; момент соприкосновения тел принят за начало отсчета.

Подставляя данные выражения в условие контакта, получаем интегральное уравнение, определяющее контактную силу:

$$\int_0^t P(\theta)Y(t - \theta)d\theta + [P(t) / k]^{2/3} = v_0 t,$$

где $Y(t) = Y^{(1)}(t) + Y^{(2)}(t)$.

Поскольку интегральный член данного уравнения зависит от значений контактной силы во все моменты времени θ , предшествующие рассматриваемому, то при достаточно малом шаге интегрирования по времени Δt можно пренебречь изменением силы в интегральной сумме за интервал

$$t - \Delta t \leq \theta \leq t.$$

С учетом вышеизложенного, выражение для определения контактной силы можно записать в следующем виде [8]:

$$P(t) = k[v_0 t - \int_0^{t-\Delta t} P(\theta)Y(t - \theta)d\theta - P(t - \Delta t) \int_0^{\Delta t} Y(\theta)d\theta]^{3/2}.$$

Таким образом, используя малый шаг Δt с помощью численного интегрирования, мы шаг за шагом вычисляем зависимость контактной силы от времени. При этом для исследуемой системы реакция стержня на единственный импульс выглядит следующим образом [9]:

при $0 < t < \frac{2l}{a}$

$$Y^{(1)}(t) = l^2 / [(2EFa)(at / l)^2];$$

при $\frac{2l}{a} < t < \frac{4l}{a}$

$$Y^{(1)}(t) = l^2 / \{(2EFa)[8 - (4 - at / l)^2]\};$$

при $\frac{4l}{a} < t < \frac{6l}{a}$

$$Y^{(1)}(t) = l^2 / \{(2EFa)[8 + (at / l - 4)^2]\}$$

и т. д.,

где $a = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$ – скорость звука в материале стержня.

Поскольку волновые процессы, происходящие в ударнике, в рамках данной модели не рассматриваются, реакция на единичное воздействие для него определяется следующим выражением [10]:

$$Y^{(2)}(t) = \frac{t^3}{6m},$$

где m – масса ударника.

Суть полуаналитического метода сводится к численному интегрированию полученного выше уравнения для вычисления контактной силы [11].

Результаты математического моделирования. Вычисление зависимости контактной силы от времени с помощью по-

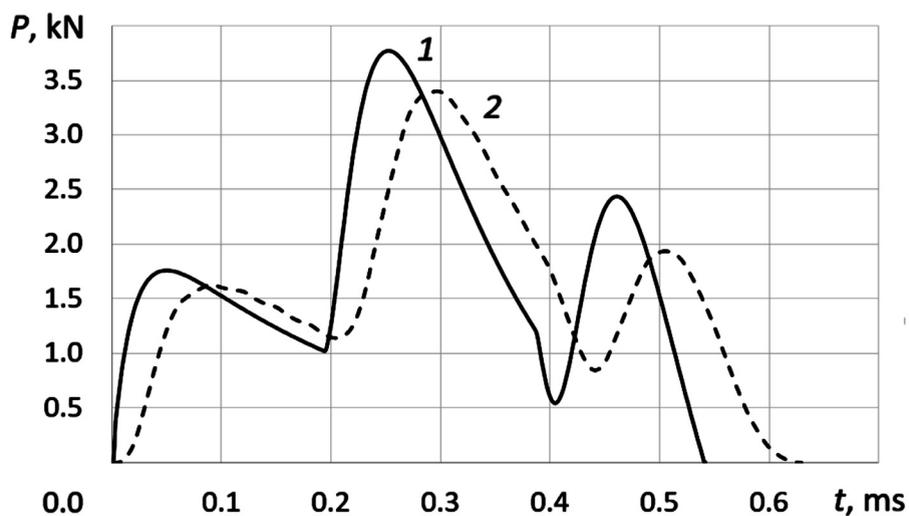


Рис. 2. Зависимости контактной силы от времени, полученные полуаналитическим методом (кривая 1) и методом конечных элементов (кривая 2); значения исходных параметров приведены в табл. 1

Таблица 1

Исходные расчетные и экспериментальные параметры системы

| Элемент системы, материал | Параметр | Обозначение | Единица измерения | Значение | |
|---------------------------|-----------------------------|-------------|-------------------|---------------------|-----------------------|
| | | | | Модель | Эксперимент |
| Стержень | Длина | l | м | 0,500 | 0,301 |
| | Площадь поперечного сечения | S | м ² | $5,0 \cdot 10^{-5}$ | $3,14 \cdot 10^{-6}$ |
| Ударник | Масса | M | кг | 0,5 | 0,13 – 8,46 |
| | Радиус сферического профиля | R | м | 0,01 | 1,58 – 6,36 |
| | Начальная скорость | V_0 | м/с | 1,0 | 0,3225 |
| Сталь | Модуль Юнга | E | Н/м ² | $2,1 \cdot 10^{11}$ | $7,342 \cdot 10^{10}$ |
| | Коэффициент Пуассона | μ | — | 0,30 | 0,34 |
| | Плотность | ρ | кг/м ³ | 7800,0 | 2696,6 |

Примечание: приведены исходные расчетные параметры для обеих моделей, которые по результатам расчета признаны наиболее удобными для сравнения.

луаналитического метода выполнялось для систем с различными параметрами. В результате данных вычислений контактная сила представляет гладкую функцию времени, которая в зависимости от параметров имеет от одного до трех максимумов.

Пример результата вычисления контактной силы с тремя максимумами приведен на рис. 2 (кривая 1) и получен при исходных параметрах системы, представленных в табл. 1.

Материалом стержня и сферического профиля ударника считалась сталь с характеристиками, приведенными также в табл. 1.

Корректность полученных результатов была проверена путем конечно-элементного моделирования системы с идентичными параметрами (см. табл. 1).

Конечно-элементная модель

Описание модели. После исследования сходимости метода конечных элементов была выбрана модель, представленная на рис. 3. Она включает в себя примерно 300 тыс. узлов и обладает примерно 1 млн. степеней свободы. Поскольку в данной задаче проводится исследование не только контактного взаимодействия стержня с ударником, но и волновых процессов, возникающих в самом стержне [12], было принято решение отказаться от использования сгущения сетки в зоне контакта. Таким образом, в процессе конечно-элементного моделирования была использована однородная сетка.

Постановка задачи в данной модели выглядит следующим образом.

Стержень изготовлен из линейно-упругого материала (как уже отмечено выше для общей модели), параметры которого приведены в табл. 1. На одном из его торцов выполняется условие заделки, то есть для всех узлов запрещены как перемещения, так и повороты. Противоположный торец стержня свободен (общая модель). В данной задаче сделано допущение об отсутствии силы тяжести, поэтому в начальный момент времени отсутствует какое-либо искривление стержня, исходно стержень неподвижен. В отличие от стержня, ударник состоит из двух материалов. Его передняя часть изготовлена из того же материала, что и стержень (упругая), а задняя — из абсолютно твердого. Такое строение ударника было выбрано по двум причинам. Во-первых, для корректного сравнения результатов с таковыми для полуаналитического метода необходимо, чтобы материалы в зоне контакта были идентичными [5]. Во-вторых, данная конструкция ударника позволяет минимизировать влияние волновых процессов в самом ударнике на применяемую модель исследований [3]. Волновые процессы в абсолютно твердом теле невозможны, что позволяет исследовать лишь волновые процессы, возникающие непосредственно в упругом стержне.

Для узлов абсолютно твердой части ударника разрешено перемещение только вдоль оси стержня, все остальные перемещения и повороты запрещены. В начальный момент времени все узлы ударника имеют скорость, направленную вдоль оси к свободному торцу стержня.

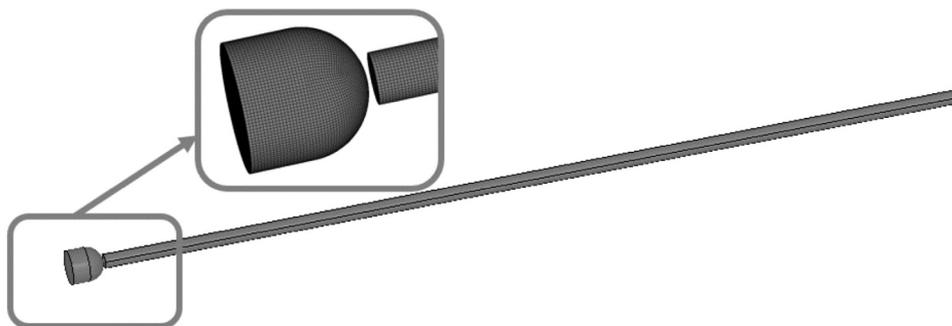


Рис. 3. Схематичное представление конечно-элементной модели (дополнительно показана увеличенная область контакта стержня с ударником)

Как уже было отмечено в начале данной статьи, одной из целей исследования являлось определение зависимости контактной силы от времени удара.

Результаты конечно-элементного моделирования. Моделирование данной задачи указанным методом производилось при различных параметрах как стержня, так и ударника. Наиболее интересные результаты были получены для варианта исходных параметров, идентичных таковым для полуаналитического метода моделирования (см. табл. 1).

Полученная зависимость контактной силы от времени представлена на рис. 2 (кривая 2).

В зависимости от входных параметров количество максимумов временной функции контактной силы может изменяться от одного до трех. Как видно из полученных результатов, в данном случае график имеет три локальных максимума.

Анализ различных результатов, полученных в ходе моделирования при разных исходных данных, говорит о том, что зависимость контактной силы от времени при ударе представляет собой довольно сложную функцию и не может быть представлена в виде таких простых функций, как, например, функция Хевисайда. В частности, при исследованиях динамической потери

устойчивости стержня следует учитывать возможные виды функции силы, прикладываемой к торцу стержня.

К одному из преимуществ конечно-элементного метода перед полуаналитическим можно отнести возможность определения множества параметров в любой момент времени (например, значений перемещений, деформаций, напряжений и т. п.). Данная возможность позволяет более детально исследовать возникающие в стержне при ударе волновые процессы, которые в конечном итоге и определяют вид контактной силы. В частности, на рис. 4 представлена временная зависимость продольного перемещения точек поперечного сечения, удаленного от начала стержня на половину его длины.

Видно, что происходит суперпозиция волн, распространяющихся в стержне. Метод также позволяет сравнивать поведение различных точек стержня с результатами натуральных экспериментов.

Сравнение результатов, полученных двумя методами

Поскольку в основе указанных методов лежат разные идеи и допущения, сравнительный анализ результатов моделирования представляет особый интерес. На рис. 2 приведено такое сравнение для временных

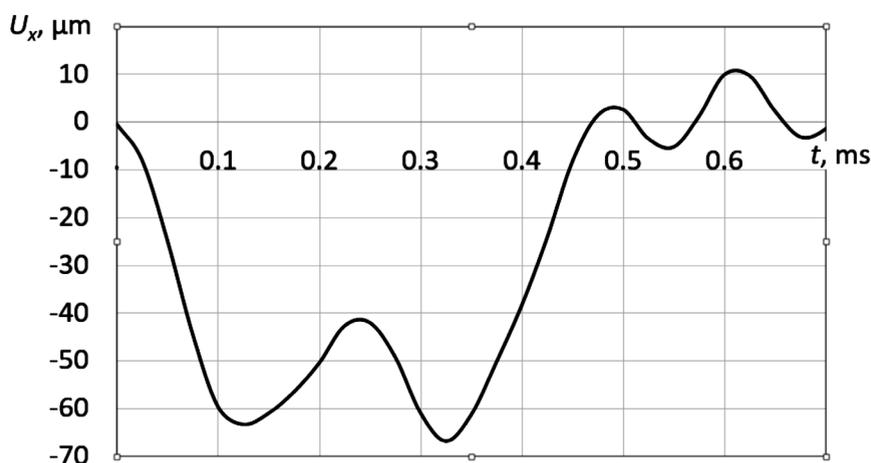


Рис. 4. Временная зависимость продольного перемещения поперечного сечения стержня; сечение удалено от начала стержня на половину его длины (результат получен методом конечно-элементного моделирования)



зависимостей контактных сил, полученных полуаналитическим и конечно-элементным методами.

При сравнении полученных графиков можно отметить идеальное качественное совпадение их вида. Если же проводить количественное сравнение расчетных результатов, то значения времени контакта отличаются на 11 %, а значения локальных экстремумов функций – на 9 %. На основании данных моделирования можно сделать заключение о хорошем совпадении результатов, полученных обоими методами, а также о корректном определении контактной силы и времени контактного взаимодействия.

Если более детально сравнивать полученные зависимости, можно заметить небольшие осцилляции на кривой, полученной конечно-элементным методом, которые отсутствуют на графике полуаналитического метода. Данные колебания можно объяснить влиянием краевых эффектов, которые не учитывает полуаналитический метод.

Сравнение результатов натурального эксперимента с данными двух расчетных методов

Натурные эксперименты служат цели ве-

рификации полуаналитического и конечно-элементного методов.

В рамках натурального эксперимента, проведенного в Национальном Тайваньском университете, был использован цилиндр радиусом 10,0 мм и длиной 30,1 мм, изготовленный из материала, параметры которого приведены в табл. 1.

На одном из концов цилиндра было выполнено условие заделки, а ко второму свободному концу в начальный момент времени подлетал стальной ударник со скоростью 0,3225 м/с (ударник имел форму шара). К свободному концу стержня была приклеена пьезоэлектрическая пленка толщиной 28 мкм и размером 7 × 3 мм, которая служила пьезодатчиком. Принцип измерения времени контактного взаимодействия цилиндра с ударником строился на пьезоэлектрическом эффекте; это время измерялось в зависимости от массы ударника (табл. 2).

Сравнение результатов конечно-элементного моделирования и полуаналитического вычисления с данными натуральных экспериментов представлено также в табл. 2.

Как видно из представленных результатов, для метода конечных элементов

Таблица 2

Сравнение экспериментальных результатов с данными, полученными двумя расчетными методами

| Значение параметра ударника | | Время контактного взаимодействия, мкс | | | Погрешность метода, % | |
|-----------------------------|----------|---------------------------------------|--------|-------|-----------------------|-------|
| Диаметр, м | Масса, г | Натурный эксперимент | МКЭ | ПАМ | МКЭ | ПАМ |
| 3,16 | 0,13 | 36,42 | 31,20 | 15,32 | 14,33 | 57,93 |
| 4,75 | 0,44 | 46,83 | 60,75 | 23,63 | 29,72 | 49,54 |
| 5,56 | 0,71 | 52,26 | 78,09 | 27,90 | 49,42 | 46,61 |
| 6,34 | 1,04 | 60,05 | 81,61 | 31,71 | 35,90 | 47,19 |
| 9,51 | 3,51 | 84,96 | 106,21 | 47,94 | 25,01 | 43,57 |
| 12,73 | 8,46 | 111,10 | 121,71 | 64,82 | 9,54 | 41,66 |

Сокращения: МКЭ – метод конечных элементов, ПАМ – полуаналитический метод (математическое моделирование).

наибольшая погрешность наблюдается при промежуточных значениях массы ударника. При наименьшей и наибольшей из выбранных масс погрешность минимальна.

Для полуаналитического метода наблюдается снижение погрешности при увеличении массы ударника. Таким образом, при минимальных значениях массы ударника наблюдается наибольшее расхождение между результатами работы полуаналитического метода и результатами, полученными в ходе натурального эксперимента и конечно-элементного моделирования. Но при увеличении массы ударника данное расхождение уменьшается.

Выводы

В данной работе использовано два принципиально разных метода (конечно-элементный и полуаналитический) для исследования динамического процесса удара по идеально упругому стержню в продольном направлении. В частности, найдены контактная сила и время взаи-

модействия. Изучены также волновые процессы, происходящие в стержне при ударе.

Полученные результаты взаимно подтвердили друг друга, и возникла естественная необходимость провести натурный эксперимент для верификации обоих методов. Кроме того, аппроксимация данных графиков дает возможность использовать такие функции для решения связанных задач. В частности, при исследовании динамической потери устойчивости стержня, применение аппроксимированных функций позволит говорить о корректном сравнении моделирования с экспериментальными результатами, поскольку ударное взаимодействие легче осуществить, чем, например, ступенчатые воздействия. Последние чрезвычайно популярны в различных модельных задачах, однако их реализация в натуральных экспериментах пока не представляется возможной.

Исследование проведено в рамках российско-тайваньского гранта РФФИ, № 16-51-52025 МНТ_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Беляев А.К., Морозов Н.Ф., Товстик П.Е., Товстик Т.П.** Биения в задаче о продольном ударе по тонкому стержню // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2015. № 4. С. 112–125.
2. **Беляев А.К., Морозов Н.Ф., Товстик П.Е., Товстик Т.П.** Параметрические резонансы в задаче о продольном ударе по тонкому стержню // Вестник Санкт-Петербургского университета. Сер. 1. 2016. № 1. С. 77–94.
3. **Беляев А.К., Ма Ч.-Ч., Морозов Н.Ф., Товстик П.Е., Товстик Т.П., Шурпатов А.О.** Динамика стержня при продольном ударе телом // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика, механика, астрономия. 2017. № 3. С. 506–515.
4. **Бидерман В.Л.** Теория механических колебаний. М.: Высшая школа, 1980. 408 с.
5. **Hertz Н.Р.** Über die Berührung fester elastischer Körper // Journ. Reine Angew. Math. (Jour de Crelle). 1881. Vol. 92. Pp. 156–171.
6. **Лурье А.И.** Теория упругости. М.: Наука, 1970. 940 с.
7. **Тимошенко С.П.** Колебания в инженерном деле. М.: Наука, 1967. 444 с.
8. **Пановко Я.Г.** Основы прикладной теории колебаний и удара. Ленинград: Политехника, 1990. 272 с.
9. **Александров Е.В., Соколинский В.Б.** Прикладная теория и расчеты ударных систем. М.: Наука, 1969. 200 с.
10. **Пановко Я.Г.** Введение в теорию механического удара. М.: Наука, 1977. 224 с.
11. **Ляв А.** Математическая теория упругости. М.: Объединение научно-технических издательств (ОНТИ), 1935. 674 с.
12. **Sears J.E.** On longitudinal impact of metal rods. Part 2 // Trans. Cambridge Phil. Soc. 1912. Vol. 21. Pp. 49 – 106.
13. **Пономарев С.Д., Бидерман В.Л., Лихарев К.К., Макушин В.М., Малинин Н.Н., Феодосьев В.И.** Расчеты на прочность в машиностроении. В 3 тт. М.: Машгиз, 1956 – 1959. Т. 3. Инерционные нагрузки: Колебания и ударные нагрузки. Выносливость. Устойчивость. М.: Машгиз, 1959. 1118 с.

Статья поступила в редакцию 16.12.2016, принята к публикации 13.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕЛЯЕВ Александр Константинович – доктор физико-математических наук, временно исполняющий обязанности директора Института проблем машиноведения РАН, профессор кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, профессор кафедры теоретической и прикладной механики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61.
vice.ipme@gmail.com

ШУРПАТОВ Анатолий Олегович – аспирант кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Россия, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a.shurpatov@gmail.com

МА Чин-Чин – доктор технических наук, профессор Национального университета Тайваня, г. Тайбэй, Тайвань.

No. 1, Section 4, Roosevelt Rd, Da'an District, Taipei City, Тайвань 10617
ccma@ntu.edu.tw

REFERENCES

- [1] **A.K. Belyaev, N.F. Morozov, P.E. Tovstik, T.P. Tovstik**, Beating in the problem of longitudinal impact on a thin rod, *Mechanics of Solids*. 50 (4) (2015) 451–462.
- [2] **A.K. Belyaev, N.F. Morozov, P.E. Tovstik, T.P. Tovstik**, Parametric resonances in the problem of longitudinal impact on a thin rod, *Vestnik St. Petersburg University*. 3 (1) (2016) 53–67.
- [3] **A.K. Belyaev, Ch.-Ch. Ma, N.F. Morozov, P.E. Tovstik, T.P. Tovstik, A.O. Shurpatov**, Dynamics of rod under axial impact by a body, *Vestnik St. Petersburg University*. 4 (3) (2017) 310–317.
- [4] **V.L. Biderman**, *Teoriya mekhanicheskikh kolebaniy* [The theory of mechanical vibrations], Vysshaya shkola, Moscow, 1980.
- [5] **H.R. Hertz**, Über die Berührung fester elastischer Körper, *Journ. Reine Angew. Math. (Jour de Crelle)*. 92 (1881) 156–171.
- [6] **A.I. Lur'e**, *Teoriya uprugosti* [Theory of elasticity], Nauka, Moscow, 1970.
- [7] **S.P. Timoshenko**, *Kolebaniya v inženernom delye* [Vibrations in engineering], Nauka, Moscow, 1967.
- [8] **Ya.G. Panovko**, *Osnovy prikladnoy teorii kolebaniy i udara* [Fundamentals of applied theory of vibrations and shock], Politekhnik, Leningrad, 1990.
- [9] **E.V. Aleksandrov, V.B. Sokolinskiy**, *Prikladnaya teoriya i raschyoty udarnykh system* [Applied theory and calculations of shock systems], Nauka, Moscow, 1969.
- [10] **Ya.G. Panovko**, *Vvedeniye v teoriyu mekhanicheskogo udara* [Introduction to mechanical shock theory], Nauka, Moscow, 1977.
- [11] **A. Lyav**, *Matematicheskaya teoriya uprugosti* [Mathematical theory of elasticity], ONTI, Moscow, 1935.
- [12] **J.E. Sears**, On longitudinal impact of metal rods. Part 2, *Trans. Cambridge Phil. Soc.* 21 (1912) 49 – 106.
- [13] **S.D. Ponomarev, V.L. Biderman, K.K. Likharev, et al.**, *Raschyoty na prochnost v mashinostroyenii*, v 3 tt., Mashgiz, Moscow, 1956 – 1959. Т. 3. Inertsionnyye nagruzki: Kolebaniya i udarnyye nagruzki. Vynoslivost, Ustoychivost [Strength calculations in mechanical engineering in 3 Vols, Vol. 3: Inertial loads: Vibrations and shock loads, Endurance, Resistance], Mashgiz, Moscow, 1959.

Received 16.12.2016, accepted 13.11.2017.

THE AUTHORS

BELYAEV Alexander K.

Institute for Problems of Mechanical Engineering of RAS
61 Bolshoi Ave. V.Is., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
vice.ipme@gmail.com

SHURPATOV Anatoliy O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

a.shurpatov@gmail.com

MA Chin-Chin

National Taiwan University

No. 1, Section 4, Roosevelt Rd, Da'an District, Taipei City, 10617, Taiwan

ccma@ntu.edu.tw



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

| | |
|-------------------------|---------------------|
| Абросимов А.С. | Махнов А.В. |
| Агарев В.Н. | Мельник Н.Н. |
| Астапенко Э.П. | Нарышкин Ю.Г. |
| Басалаев А.Е. | Огнев Б.И. |
| Беляев А.К. | Петраков А.П. |
| Быков Н.Ю. | Платко А.П. |
| Галиханов М.Ф. | Романов Д.П. |
| Горобей Н.Н. | Сапрыкина Н.Н. |
| Гороховатский Ю.А. | Смирнов Е.М. |
| Жуков Н.Н. | Сотова Ю.И. |
| Зимин С.П. | Степанов В.А. |
| Исаенко И.И. | Степанова Т.П. |
| Капралова В.М. | Ткаченко А.А. |
| Карулина Е.А. | Трегулов В.В. |
| Клинков В.А. | Хрипунов А.К. |
| Кузнецов С.Н. | Черепанов А.С. |
| Левченя А.М. | Чуляева Е.Г. |
| Лукьяненко А.С. | Чумаков Ю.С. |
| Ма Ч.-Ч. | Шахович К.Б. |
| Малах Х. | Шмидт А.А. |
| Мамонтов А.И. | Шурпатов А.О. |
| Марченко А.В. | |

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 11, № 1, 2018**

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт <http://ntv.spbstu.ru>

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 26.02.2018. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 21,2. Уч.-изд. л. 21,2. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.



УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ». **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под двоянными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия.** Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Digest». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без пере- носов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться **ДОСРОЧНО**.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:

(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Наталья Александровна

или по e-mail: physics@spbstu.ru