



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

ТОМ 10, № 4
2017

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;
Каприлова 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>

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

VOLUME 10, No. 4
2017

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>

Содержание

Физика конденсированного состояния

Самдани М., Рамадевуду Г., Чари М.Н., Шарифуддин М. Исследования ЭПР, оптических и других физических свойств стекол состава $MgO-BaO-B_2O_3-TeO_2$, активированных ионами Cr^{3+} (статья на английском языке)	7
--	---

Математическое моделирование физических процессов

Панов Д.О., Рис В.В., Смирнов Е.М. Вихреразрешающее численное моделирование трехмерного турбулентного течения в канале с резким поворотом на 180 градусов	21
Кандасами Р., Зайлани Н.А.Б.М., Фатиха Ф.Н.Б.Дж. Влияние объемных долей наночастиц в водных наножидкостях на характеристики сжимаемого МГД-потока этих жидкостей по пористой поверхности датчика (статья на английском языке)	34
Панди А.К., Кумар М. Влияние химической реакции и теплового излучения на характеристики пограничного слоя потока наножидкости, обтекающего клин с вязкой и омической диссипациями (статья на английском языке)	54

Приборы и техника физического эксперимента

Жителев В.А., Звир Е.А., Куприенко М.В., Строжук А.В., Нуруллина Г.Д. Эмиссионная гамма-томография экспериментальной тепловыделяющей сборки реактора БОР-60	73
Бодров А.И., Зоркин В.С., Чуляева Е.Г., Паюров А.Я., Кюн В.В. Определение гармонических составляющих шума на фоне других видов шума лазерного излучения	82

Физическая электроника

Кудюкин А.И., Борисовский П.А., Гаврилов С.В., Махмудов М.Н., Моос Е.Н., Киселев Г.В., Киселева Л.И., Степанов В.А. Особенности эволюции морфологии поверхности электродов лазера в плазме газового разряда	92
--	----

Физика молекул

Зезина Т.И., Цыбин О.Ю. Субпикосекундная динамика дипольного момента молекулярных полиаланинов	100
---	-----

Теоретическая физика

Овчинников С.Ю., Ларионов Н.В., Смирновский А.А., Шмидт А.А. Образование квантовых вихрей при ионизации атома импульсом электромагнитного поля	111
Кумар В., Каур Л. О решении уравнений гравитационного поля, созданного вращающимися телами, в общей теории относительности (статья на английском языке)	124
Саксена Г., Каушик М. Существование форм ядер изотонов, имеющих 28 нейтронов и дефицит протонов (статья на английском языке)	134
Авторский указатель	143

Contents

Condensed matter physics

Samdani M., Ramadevudu G., Chary M.N., Shareefuddin M. <i>EPR, optical and other physical studies of Cr³⁺-doped MgO-BaO-B₂O₃-TeO₂ glasses</i>	7
--	---

Simulation of physical processes

Panov D.O., Ris V.V., Smirnov E.M. <i>Eddy resolving numerical simulation of a 3D turbulent flow in a 180-degree bend of strong curvature</i>	21
Kandasamy R., Zailani N.A.B.M., Fatiha F.N.B.J. <i>Impact of nanoparticle volume fractions in the water-based nanofluids on the squeezed MHD nanofluid's flow over a porous sensor surface</i>	34
Pandey A.K., Kumar M. <i>Chemical reaction and thermal radiation effects on a boundary layer flow of nanofluid over a wedge with viscous and Ohmic dissipation</i>	54

Experimental technique and devices

Zhitelev V.A., Zvir E.A., Kuprienko M.V., Strozhuik A.V., Nurullina G.D. <i>Emission gamma tomography of the test fuel assembly for BOR-60 reactor</i>	73
Bodrov A.I., Zorkin V.S., Chulyaeva E.G., Payurov A.Ya., Kyun V.V. <i>Determination of harmonic noise components against the background of other types of laser noise</i>	82

Physical electronics

Kudyukin A.I., Borisovsky P.A., Gavrilov S.V., Makhmudov M.N., Moos E.N., Kiselyov G.V., Kiselyova L.I., Stepanov V.A. <i>Evolution features of laser electrode-surface morphology in the gas discharge plasma</i>	92
---	----

Physics of molecules

Zeina T.I., Tsybin O.Yu. <i>Subpicosecond dynamics of the molecular polyaniline dipole moment</i>	100
--	-----

Theoretical physics

Ovchinnikov S.Yu., Larionov N.V., Smirnovsky A.A., Schmidt A.A. <i>Formation of quantum vortices upon atom ionization by a pulse of electromagnetic waves</i>	111
Kumar V., Kaur L. <i>On the solutions of field equations due to rotating bodies in General Relativity</i>	124
Saxena G., Kaushik M. <i>N = 28 isotones: shape coexistence towards proton deficient side</i>	134
<i>Author index</i>	143

DOI:10.18721/JPM.10401

UDC 538.95

EPR, OPTICAL AND OTHER PHYSICAL STUDIES OF Cr³⁺-DOPED MgO-BaO-B₂O₃-TeO₂ GLASSES

M. Samdani¹, G. Ramadevudu², M.N. Chary³, M. Shareefuddin³

¹Salalah College of Technology, Salalah, Oman;

²Vasavi College of Engineering, Hyderabad, India;

³Osmania University, Hyderabad, India

Physical, optical and electron paramagnetic resonance (EPR) studies of 15MgO-15BaO-(59.8 - x)B₂O₃-(10.0 + x)TeO₂-0.2Cr₂O₃ (x = 0, 10, 20, 30 mole %) glass samples have been reported. EPR spectra exhibited some resonance signals. The first one (g = 4.80) had a large zero field splitting parameter (D) and $E/D \leq 1/3$, it was attributed to isolated Cr³⁺ centers in strongly distorted octahedral sites; the second one (g = 1.98) was assigned to Cr³⁺ centers at axially distorted octahedral sites. The resonance signal at g = 4.26 was assigned to Fe³⁺ ions, which were in the glass matrix as unwanted impurities. The resonance signal at g = 1.91 indicated the Cr³⁺-Cr³⁺ exchange coupled pairs. In the optical absorption spectra, the two observed broad optical bands with 16025 cm⁻¹ and 23474 cm⁻¹ were assigned to $^4A_g(F) \rightarrow ^4T_{2g}(F)$ and $^4A_g(F) \rightarrow ^4T_{1g}(F)$ transitions, respectively. The site symmetry of Cr³⁺ is C_{4v} or C_{3v} . Racah parameters, crystal field (Dq) parameters and energy gap were evaluated from the optical spectra. Various other physical parameters like density, etc., are also reported.

Key words: borotellurite glass; electron paramagnetic resonance (EPR); optical absorption; physical properties

Citation: M. Samdani, G. Ramadevudu, M.N. Chary, M. Shareefuddin, EPR, optical and other physical studies of Cr³⁺-doped MgO-BaO-B₂O₃-TeO₂ glasses, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 7–20. DOI: 10.18721/JPM.10401

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭПР, ОПТИЧЕСКИХ И ДРУГИХ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЕКОЛ СОСТАВА MgO-BaO-B₂O₃-TeO₂ , АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ Cr³⁺

М. Самдани¹, Г. Рамадевуду², М.Н. Чари³, М. Шарифуддин³

¹ Технологический колледж г. Салала, г. Салала, Оман;

² Инженерный колледж Васави, г. Хайдарабад, Индия;

³ Османский университет, г. Хайдарабад, Индия

Представлены исследования электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), оптических и других физических свойств стекол системы 15MgO-15BaO-(59,8 - x)B₂O₃-(10,0 + x)TeO₂-0,2Cr₂O₃ (x = 0, 10, 20, 30 мол. %). В спектрах ЭПР обнаружено несколько резонансных сигналов. Сигнал с

$g = 4,80$, высоким значением параметра тонкого расщепления в нулевом магнитном поле (D) и значением отношения $E/D \leq 1/3$ приписан изолированным центрам Cr^{3+} в сильно искаженных октаэдрических позициях. Сигнал с $g = 1,98$ отнесен к центрам Cr^{3+} , локализованным в аксиально искаженных октаэдрических позициях. Резонансный сигнал с g -фактором, равным 4,26, идентифицирован как парамагнитное поглощение СВЧ ионами Fe^{3+} , которые присутствуют в матрице стекла как нежелательная примесь. Резонансный сигнал с $g = 1,91$ указывает на присутствие обменно-связанных пар ионов хрома $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$. Спектры оптического поглощения характеризуются двумя широкими полосами на частотах 16025 и 23474 см^{-1} ; они соотносятся с переходами ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F)$ и ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(F)$ соответственно. Симметрия позиций ионов $\text{Cr}^{3+} - C_{4v}$ или C_{3v} . По оптическим спектрам оценены параметры Рака, параметр кристаллического поля Dq и величина энергетического зазора. Дополнительно приводятся другие физические параметры стекла, такие как плотность и пр.

Ключевые слова: боротеллуритное стекло; электронный парамагнитный резонанс (ЭПР); оптическое поглощение; физические свойства

Ссылка при цитировании: Самдани М., Рамадевуду Г., Чари М.Н., Шарифуддин М. Исследования ЭПР, оптических и других физических свойств стекол состава $\text{MgO-BaO-B}_2\text{O}_3\text{-TeO}_2$, активированных ионами Cr^{3+} // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 7–20. DOI: 10.18721/JPM.10401

1. Introduction

Currently, a great scientific revolution has been carried out by means of telecommunication, through mobile phones or via the Internet. People are connected to the entire world through the Internet and the world has become a global village. The entire high-speed telecommunication signal transmission basically depends on the optical fiber network. The optical fiber network requires switches and routers. These electronic boxes particularly cannot meet the demands of the communication industry [1] because their linear and nonlinear properties play an important role in determining the features [2, 3]. For example, linear properties like the refractive index of transparent medium change with the intensity of light travelling through it [4]. Thus, the glass industry plays a crucial role in glass fibers, whereas organic materials show very poor mechanical and thermal properties. Finally, an amorphous material like glass is a very good option for high intrinsic transparency, fast response time [5], excellent resistance to atmospheric conditions, mechanical and chemical durability. Hence glass is an important material in the field of optics [6] and optical communication systems.

Boric acid (H_3BO_3) is one of the important

oxides for the glass formation. It exhibits a variety of structural changes when combined with different alkali and alkaline earth oxides. Linear and nonlinear properties of borate glasses change with the composition of oxides [7]. It is also used as dielectric and insulating medium as a shield against infrared radiation [8]. TeO_2 -based glasses are used in nonlinear devices due to their property of forming glasses with a higher refractive index ($n > 2$), good thermal stability and low melting temperature [9]. The desired linear and nonlinear optical susceptibility changes can be obtained by the combination of B_2O_3 and TeO_2 in the glass matrix. Addition of different oxides and transition-metal ions in borotellurite glasses will tend to increase the photoluminescence response.

Transition-metal ion chromium (Cr^{3+}) is used in the fabrication of stainless steel and alloys. This ion has an incomplete $3d^n$ ($n < 10$) shell, so it can be used as a paramagnetic spin probe. Several researchers [10 – 13] have carried out studies of EPR spectral response and optical studies of Cr^{3+} -doped alkali and alkaline earth oxide borate glasses. To the best of our knowledge, until now no studies in the properties of $\text{MgO-BaO-B}_2\text{O}_3\text{-TeO}_2$ glasses have been conducted. In this context, we would like to focus on the effect of variation of B_2O_3 and TeO_2 concentrations on various physical, optical and EPR properties of these glasses.

Table 1

Composition of glass samples and their physical parameters

Glass code	MgO	BaO	B ₂ O ₃	TeO ₂	Cr ₂ O ₃	<i>M</i>	ρ_{th}	<i>V_M</i>	<i>n</i>	<i>A_{th}</i>
	mole %					g/mole	g/cm ³	cm ³ /mol		
MBBTCr-1	15	15	59.8	10	0.2	125.8	3.34	37.67	2.74	0.173
MBBTCr-2	15	15	49.8	20	0.2	129.4	3.70	34.98	2.77	0.152
MBBTCr-3	15	15	39.8	30	0.2	133.0	4.06	32.76	2.78	0.131
MBBTCr-4	15	15	29.8	40	0.2	136.6	4.43	30.84	2.79	0.110

Notations: *M* (± 0.001) is the average molecular weight; ρ_{th} (± 0.001) is the theoretical density; *V_M* (± 0.01) is the molar volume; *n* is the refractive index; *A_{th}* is the interaction parameter.

2. Experimental procedure

The melt-quenching technique was used to prepare the glass samples in the composition 15MgO-15BaO-(59.8 - *x*)B₂O₃-(10.0 + *x*)TeO₂-0.2Cr₂O₃ (*x* = 0, 10, 20, 30 mole %). Analar grade boric acid (H₃BO₃), tellurium oxide (TeO₂), magnesium oxide (MgO), barium oxide (BaO) were used for the preparation of present glasses. These oxides were weighed proportionally in mole % and then transferred to porcelain crucibles and kept in an electrically heated furnace at a temperature of around 1000°C. It took approximately an hour to melt the mixtures congruently. The molten liquid was poured onto a steel plate (maintained at 200 °C) and then pressed with another steel plate. The glasses obtained by this way were transparent and bubble-free. To relieve mechanical stress, the samples were annealed at around 200 °C for 2 hrs. The variations of chemical composition in these glasses are given in Table 1. The amorphous nature of the samples was confirmed by X-ray diffraction. EPR spectra were recorded for dry and perfectly powdered glass samples at room temperature using an EPR spectrometer JEOL FE 1X operating at X-band frequency (9.205 GHz) with a modulation frequency of 100 kHz. The optical absorption spectra were recorded with a UV-VIS-NIR spectrophotometer in the wavelength range of 300 – 800 nm at room temperature.

3. Results and discussion

3.1. Density and molar volume. The following empirical equation [14] was used to calculate the theoretical densities of the prepared

glass samples

$$\rho_{th} = 0.53 \Sigma (M_i \cdot x_i) / [\Sigma (V_i \cdot x_i)], \quad (1)$$

where *x_i* is the mole fraction of different oxides; *M_i* is the molecular weight of each oxide; *V_i* is the packing density parameter of each oxide, calculated using the relation

$$V_i = (4/3) \pi N_A (X \cdot r_m^3 + Y \cdot r_o^3), \quad (2)$$

where *N_A* is the Avogadro number; *r_m*, *r_o* are (respectively) the ionic radii of metal and oxygen atoms for M_XO_Y oxide.

The calculated density and molar volume values are presented in Table 1. The density values are reproducible to ± 0.02 g/cm³, the molar volume (*V_M*) is calculated using the relation

$$V_M = M_t / \rho_{th},$$

where *M_t* is the total molecular weight of the multicomponent glass, ρ_{th} is the density.

Fig. 1 shows changes in the density ρ_{th} and the molar volume *V_M* with the TeO₂ content. By substituting TeO₂ for B₂O₃ we observed an increase in density values from 3.34 to 4.43 g/cm³, whereas the molar volume decreased from 37.67 to 30.84 cm³/mol. The changes are attributed to the structural rearrangement of TeO₂ atoms in the borate glass network. TeO₂ acts as a network modifier causing the creation of more nonbridging oxygen atoms. Hence packing of molecules becomes denser as the concentration increases, and thereby there is an increase in density [15]. A reduction in the molar volume is due to a decrease in the bond length or interatomic spacing between the atoms.

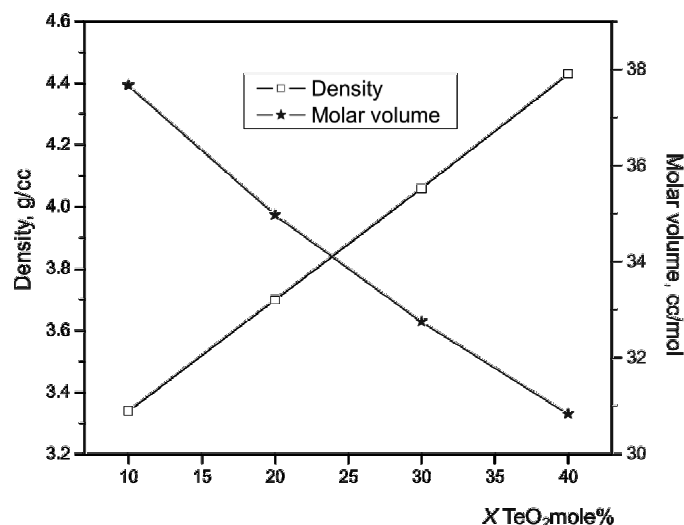


Fig. 1. Changes in the density and the molar volume of the multicomponent glasses with TeO₂ content

3.2. Optical absorption. The spectra of Cr³⁺ (3d³) free ion are characterized by two states, the ⁴P, ⁴F quartet state (Fig. 2, a) and the ²G, ²H doublet state (Fig. 2, b). The quartet state purely depends on the crystal field, whereas the double state does not depend on the crystal field. An octahedral crystal field symmetry (quartet state) exhibits broad spin-allowed absorption bands due to

$${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F),$$

$${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(F),$$

$${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(P)$$

transitions.

In a weak field, the ground state represents the t_{2g}^3 orbital (Fig. 3, a). On the other hand, the two spin-forbidden bands are due to

$${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^2E_g(G),$$

$${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^2T_{1g}(G)$$

transitions (Fig. 3, b).

Fig. 4 shows the optical absorption spectra of glass samples. These spectra exhibited various broad bands. The band at a wave number of 16025 cm⁻¹ was assigned to ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F)$ spin-allowed transition. Such an assignment argues for the site symmetry of Cr³⁺ as either C_{4v} or C_{3v} in the glass structure. The other band with the wave number of 23474 cm⁻¹ was assigned to the ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(F)$ spin-allowed

transition. A low-resolved optical absorption band with a wave number of 28011 cm⁻¹ may be masked by the fundamental absorption edge; it was assigned to the ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(P)$ transition [16]. The dip in the absorption spectra around 700 nm indicates the presence of the Fano

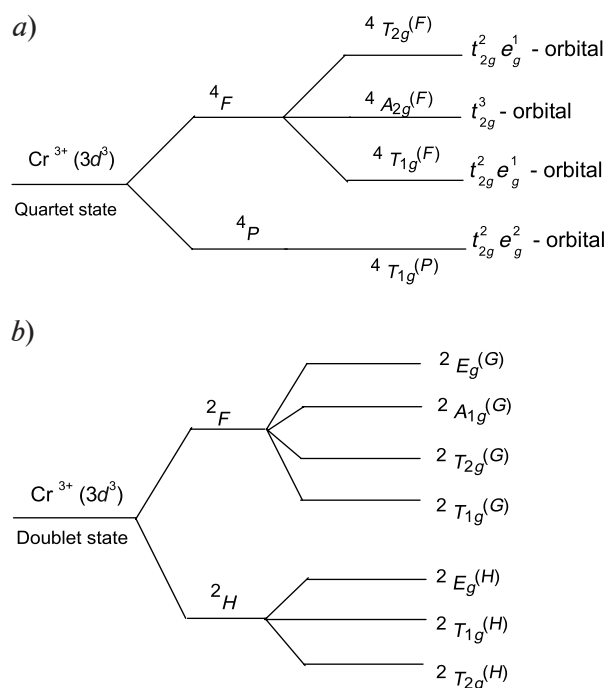


Fig. 2. Splitting scheme of energy levels for the ⁴P, ⁴F quartet (a) and the ²G, ²H doublet (b) states in the crystal field of the octahedral symmetry

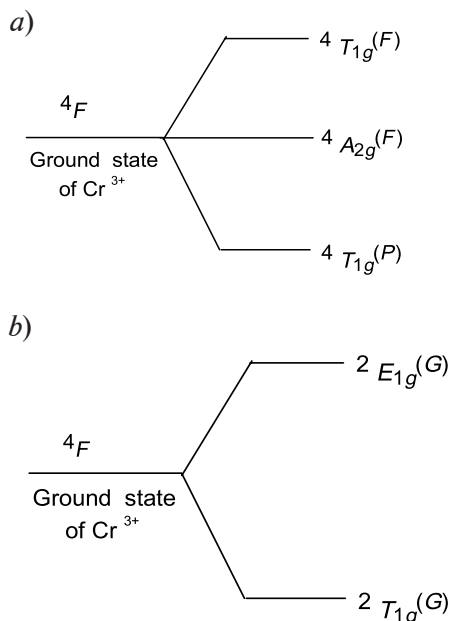


Fig. 3. Spin-allowed (a) and spin-forbidden (b) transitions in the weak crystal field; the former depend on the field, the latter do not

antiresonance [17 – 19].

Optical absorption spectra can be used to obtain additional information such as the structural and bonding nature of Cr^{3+} ions in the boric oxide from the Racah parameters (B , C and Dq). These parameters can be calculated from the following relations [16]:

$$Dq = E(^4A_{2g} - ^4T_{2g}) / 10; \quad (3)$$

$$Dq/B = 15(X - 8) / (X^2 - 10X), \quad (4)$$

$$\text{where } X = (E_1 - E_2) / Dq; \quad (5)$$

$$(^4A_{2g} - ^4T_{2g}) = 10Dq + 4B + 3C;$$

$$h = [(B_{free} - B) / B_{free}] / K_{\text{Cr}^{3+}}, \quad (6)$$

where Dq is the (1/10)-th of the energy of the $^4A_{2g}(F) \rightarrow ^4T_{2g}(F)$ transition, $B_{free} = 918 \text{ cm}^{-1}$, B is the interelectron repulsion in the d -shell, C is the bonding between Cr^{3+} ion and its ligand, $K_{\text{Cr}^{3+}} = 0.21$ [20].

The calculated Racah parameter values are in good agreement with Cr^{3+} -containing glasses [21]. The value $Dq / B < 2.3$ corresponds to the $^4A_{2g}(F) \rightarrow ^4T_{2g}(F)$ spin-allowed transition. This transition has had an impact on laser applications and it indicates that Cr^{3+} centers are mostly localized in the low field sites [22]. The parameter h indicates the nephelauxetic function of ligands. The h parameter indicated an increase with increasing TeO_2 content in the glass samples under study. This result points to an increase of ionic-bond nature between Cr^{3+} and its ligands in the glass matrix.

It is known that the Dq/B value is less than 2.3 in the weak crystal-field sites, greater than 2.3 in the strong ones, and this value is equal to 2.3 in the intermediate fields. In the present work, the Dq / B value was found to be

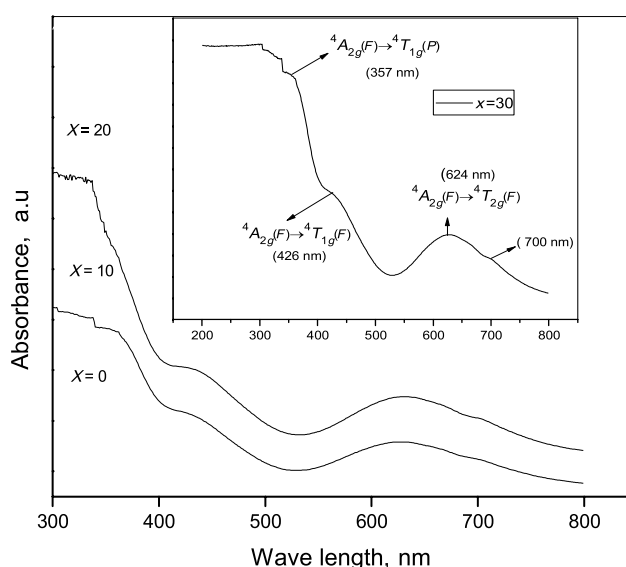


Fig. 4. Optical absorption spectra of $15\text{MgO}-15\text{BaO}-(59.8-x)\text{B}_2\text{O}_3-(10.0+x)\text{TeO}_2$ glasses doped with Cr^{3+}

Table 2

Optical absorption spectra identification and some parameters of chromium ions in the glass systems MBBTCr

Transition, parameter		Parameter value			
		MBBTCr-1	MBBTCr-2	MBBTCr-3	MBBTCr-4
${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^2T_{1g}(P)$	λ , nm	357	360	357	351
	λ^{-1} , cm^{-1}	28011	27777	28011	28490
${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(F)$	λ , nm	426	430	431	440
	λ^{-1} , cm^{-1}	23474	23255	23201	22757
${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F)$	λ , nm	624	630	633	640
	λ^{-1} , cm^{-1}	16025	15873	15797	15625
h		0.659	0.665	0.665	0.883
Dq/B , $\text{cm}^{-1}/\text{cm}^{-1}$		2.03	2.01	2.00	2.09
B , cm^{-1}		790	787	789	747
C , cm^{-1}		2940	2915	3018	3291
Ip		0.63	0.60	0.58	0.55

Notations: λ , λ^{-1} are the wavelength and the wave number for the optical absorption peak positions; Dq/B , B , C are the Racah parameters; h is the nephelauxetic parameter; Ip is the Cr^{3+} ionic porosity.

Notes: According to Ref. [24], the Racah parameters are the following: $Dq/B = 2.65$, $B = 619 \text{ cm}^{-1}$, $C = 2233 \text{ cm}^{-1}$

around 2.0. This indicated that Cr^{3+} ions are in the weak ligand field sites. Different calculated Racah parameters are given in Table 2.

By correlating EPR and optical data, the chemical bonding parameter α is evaluated using the following relation [23]:

$$g_0 = g_e - 8\alpha\lambda/\Delta, \quad (7)$$

where g_e is the g -factor of a free electron ($g_e = 2.0023$), λ is the spin-orbit coupling constant ($\lambda = 91 \text{ cm}^{-1}$), $\Delta({}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F))$ is the energy gap between the excited and the ground levels. The value $g_0 = 1.98$ was taken.

3.3. Energy gap, refractive index and interaction parameters. In the ultraviolet region, the studies of optical absorption edge from the absorption spectra have revealed various optical transitions such as a direct and an indirect band transitions. It is well-known that Cr^{3+} ions have three unpaired electrons in the $3d$ -shell, hence, in the presence of electromagnetic waves, these unpaired electrons exchange their energies in the valence band and shift to the conduction band. Various anions, involved in the glass composition system as glass-forming oxides, influence the conduction band, even though the significant role of cations should not be

ignored [24].

Fig. 4 shows the optical absorption spectra of $15\text{MgO}-15\text{BaO}-(59.8 - x)\text{B}_2\text{O}_3-(10.0 + x)\text{TeO}_2-0.2 \text{Cr}_2\text{O}_3$ glasses. The absorption edges of these glasses are not sharp as seen from the figure. Diffuse absorption edges are characteristic of amorphous nature. The shifting of absorption edges towards the higher wavelength may be due to a decrease in the rigidity of glasses as the TeO_2 concentration increases over that of B_2O_3 .

The relationship between the photon energy $\hbar\omega$ and the optical energy gap E_{opt} is given by the following relation [25]:

$$\alpha(\omega) = [\text{const}/(\hbar\omega)]/(\hbar\omega - E_{opt})^r. \quad (8)$$

The direct and indirect allowed transitions are given by $r = 1/2$ and $r = 2$, respectively.

Plotting the graphs for $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ versus $\hbar\omega$ yields direct band gap (E_{opt}) energies, while plotting the graphs for $(\alpha\hbar\omega)^2$ versus $\hbar\omega$ yields indirect band gap (E_{opt}) energies, known as Tauc's plots. Optical band gaps calculated from Tauc's plots are shown in Fig. 5, *a*. By extrapolating the linear portion of $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ and $(\alpha\hbar\omega)^2$ curves at $\hbar\omega = 0$ we obtain the direct and indirect band gap values (in eV). The optical

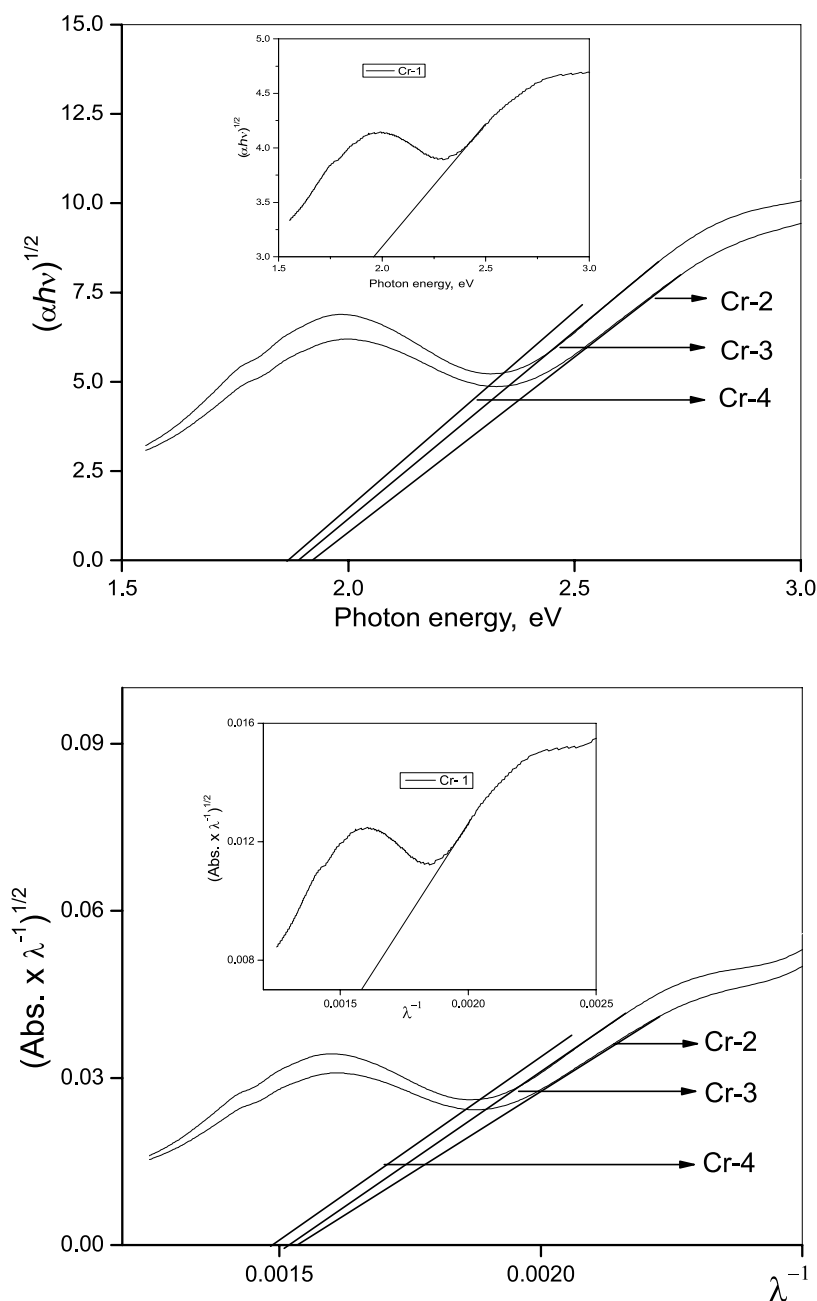


Fig. 5. The Tauc's (a) and the absorption spectrum fitting (ASF) (b) plots of all glass samples

band gap values can also be obtained from the absorption spectrum fitting (ASF) method proposed by Escobar – Alarcon, et al. [26]. Energy band gap values calculated by the ASF method are denoted as E_{opt}^{ASF} and obtained by extrapolating the linear portion of the $(a/\lambda)^{1/r}$ versus $(1/\lambda)$ curve (Fig. 5, b) at $(a/\lambda)^{1/r} = 0$.

The value of the band gap E_{opt}^{ASF} in eV can be obtained from the parameter λ_g using the expression

$$E_{opt}^{ASF} = 1239.83 / \lambda_g. \quad (9)$$

The direct and indirect band gap values are given in Table 3. The optical band gap values obtained from Tauc's plots are in agreement with those obtained by the ASF method (Fig. 6). The decrease in energy gaps from 1.96 to 1.86 eV for indirect band transitions and from 3.15 to 3.05 eV for direct ones indicates that the structure of the resulting glasses has become less

Table 3

Optical energy gaps and some other parameters obtained from optical and EPR spectra of Cr³⁺-doped glasses

Glass code	E_g , eV		E_{opt}^{ASF} , eV		R_i , Å	α	$N \times 10^{22}$, (kg) ⁻¹	$\chi \times 10^{-3}$, m ³ (kg) ⁻¹
	$r = 1/2$	$r = 2$	$r = 1/2$	$r = 2$				
MBBTCr-1	1.96	3.15	1.95	3.13	21.84	0.490	1.35	1.35
MBBTCr-2	1.91	3.10	1.90	3.09	21.31	0.486	5.43	5.45
MBBTCr-3	1.89	3.08	1.87	3.07	20.85	0.480	8.90	8.95
MBBTCr-4	1.86	3.05	1.84	3.03	20.44	0.470	13.22	13.28

Notations: E_g , E_{opt}^{ASF} are the optical energy gaps, obtained using the Tauc's and the absorption spectrum fitting (ASF) plots, relatively; $r = 1/2$ and $r = 2$ correspond to the direct and indirect allowed transitions, relatively; R_i is the interionic distance; α is the chemical bonding parameter; N is the spin concentration; χ is the magnetic susceptibility.

ordered. The increase in TeO₂ concentration results in the breaking of regular structure of borotellurite glasses, which leads to a decrease in the energy gap [2]. The decrease may also be due to an increase in disorder in the glass and a further extension of localized states within the gap according to Ref. [27]. It was also observed that the indirect band gap values were larger than the direct ones.

The relation proposed by Dimitrov and Sakka [28] is in the form

$$(n^2 - 1)/(n^2 + 2) = 1 - (E_{opt}/20)^{1/2} \quad (10)$$

and used to calculate the refractive index n .

The molar refraction R_m (expressed in cm³)

is related to the structure of the glass given by the Lorentz – Lorentz equation

$$R_m = (n^2 - 1)V_m / (n^2 + 2), \quad (11)$$

where V_m is the molar volume; the quantity

$$(n^2 - 1)/(n^2 + 2)$$

represents the reflection loss.

From relation (10), it is clear that as E_{opt} decreases, the refractive index n shall obviously increase. As V_m decreases, n shall increase. However, as the TeO₂ content increases in the glass matrix, Te – O – Te bonds break up and nonbridging oxygen is created. Thus, the ionic character of bonding in the glasses increases [7].

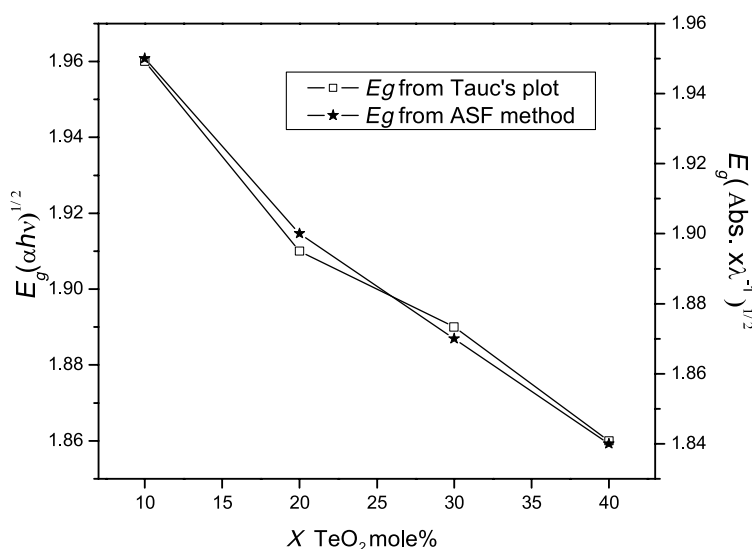


Fig. 6. E_g as functions of TeO₂ concentration obtained from Tauc's and ASF plots for glasses with 0.2 mol% of Cr³⁺ ions

The theoretical interaction parameter A_{th} was calculated using the following relation:

$$A_{th} = X_{MgO} A_{MgO} + X_{BaO} A_{BaO} + X_{B_2O_3} A_{B_2O_3} + X_{TeO_2} A_{TeO_2} + X_{Cr_2O_3} A_{Cr_2O_3}; \quad (12)$$

their values along with R_i are presented in Table 3.

Average oxide ion polarizability of the ion is described by A_{th} , and indicates the interatomic interaction.

3.4. Electron paramagnetic resonance (EPR). In the glass matrix, Cr^{3+} ions may exist as isolated Cr^{3+} ions and exchange-coupled $Cr^{3+}-Cr^{3+}$ ion pairs [24]. The ground state of a Cr^{3+} free ion is 4F . It belongs to the $3d^3$ electronic configuration. In the absence of a magnetic field, spin-orbit coupling splits one state level into the Kramer's doublet ($|\pm 1/2\rangle$ and $|\pm 3/2\rangle$) separated by $2D$ energy distance, where D is the zero field splitting parameter. In the presence of the external magnetic field, the spin-orbit coupling splits into various transitions like

$$|-3/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle, |-1/2\rangle \leftrightarrow |1/2\rangle, |1/2\rangle \leftrightarrow |3/2\rangle$$

at $g\beta B - 2D$, $g\beta B$, $g\beta B + 2D$, respectively. In all the transitions the maximum separation is $4D$ [29].

$^4A_{2g}$ is the ground state level of Cr^{3+} ion in an octahedral crystal field. In this field 4F state splits into the 4A_g singlet, $^4T_{1g}$ and $^4T_{2g}$ orbital triplets [24]. A large separation in spin-orbit transition leads to two resonance signals at $g \approx 2 - 5$ [30 - 33]. So far EPR spectra of Cr^{3+} ion-doped borate glasses [34] and borotellurite glasses [35, 36] were reported. Spin-Hamiltonian parameters of the $15MgO-15BaO-(59.8 - x)B_2O_3-(10.0 + x)TeO_2-0.2Cr_2O_3$ glass systems under consideration were calculated by the following relation [22]:

$$H = \mu_B(BgS) + D\{S_z^2 - [S(S+1)/3]\} + E(S_x^2 - S_y^2), \quad (13)$$

where μ_B is the Bohr magneton; B is the magnetic field; D , E are the fine structure constants for axial and rhombic fields, respectively.

EPR spectra of the glass samples doped with chromium are shown in Fig. 7.

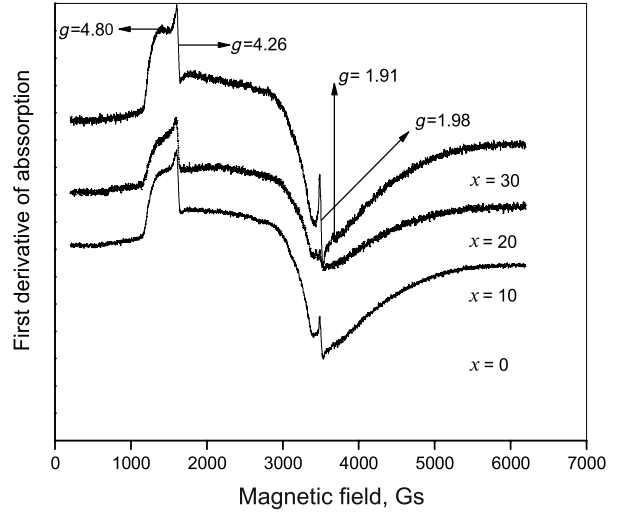


Fig. 7. EPR spectra of $15MgO-15BaO-(59.8 - x)B_2O_3-(10.0 + x)TeO_2-0.2Cr_2O_3$ glasses for various x at room temperature

The resonance signal at $g = 4.80$ assigned to $Cr^{3+}(I)$ indicated isolated Cr^{3+} centers in strongly distorted octahedral sites. This resonance signal exhibited a large zero field splitting parameter D ; $E > g\mu_B B$, and $E/D \leq 1/3$ [30, 31]. The resonance signal at $g = 1.98$ assigned to $Cr^{3+}(II)$ indicated isolated Cr^{3+} centers in axially-distorted octahedral sites. This resonance signal also has a large value of D and $E/D \ll 1/3$. The resonance signal at $g = 1.91$ indicates $Cr^{3+}-Cr^{3+}$ exchange-coupled pairs [13]. Apart from these resonance signals, one more resonance signal at $g = 4.26$ was observed and assigned to Fe^{3+} ions, which were unwanted impurities and can be also present in the undoped glasses [20, 37]. The values of g obtained for the glass compositions in the present study are in tune with other glass systems reported in the literature [24, 38].

3.5. Number of spins and susceptibility. The variations in the number of spins N and the susceptibility χ with TeO_2 content are shown in Fig. 8 and the values are given in Table 3. The number N of spins participating in the resonance at $g = 1.98$ was obtained from the formula given by Weil, et al. [39]:

$$N = (A_x/A_{std}) \cdot [(Scan_x)^2/(Scan_{std})^2] \times (G_{std}/G_x) [(H_m)_{std}/(H_m)_x] [(g_{std})^2/(g_x)^2] \times \{ [S(S+1)]_{std}/[S(S+1)]_x \} \times [(P_{std})^{1/2}/(P_x)^{1/2}] \cdot std, \quad (14)$$

where A is the area under the absorption curve, which can be obtained by double integrating the first derivative of the EPR absorption curve; Scan is the magnetic field corresponding to a unit length of the chart; G is the gain; H_m is the width of the modulation field; g is the g -factor; S is the spin of the system in its ground state; P is the power of the microwave source. The subscripts x and std represent the corresponding quantities for the glass and the standart samples ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), respectively.

The susceptibility χ of the sample can be calculated using the formula [40]:

$$\chi = Ng^2\beta^2J(J+1)/(3k_B T), \quad (15)$$

where N is the number of spins per m^3 ; the other symbols have their usual meaning.

N can be calculated from Eq. (14) while calculating the χ values; $g = 1.98$ was taken. In borate glasses the addition of TeO_2 content results in the increase of open network, thus the number of nonbridging oxygens increases in the glass network, and this effect weakens the O^{2-} bonds for every Cr^{3+} ions. Hence, the interatomic distance between Cr^{3+} ions decreases and so the number of spins participating in the resonance increases.

4. Conclusions

On the basis of EPR and optical absorption studies on $15\text{MgO}-15\text{BaO}-(59.8-x)\text{B}_2\text{O}_3-(10.0+x)\text{TeO}_2-0.2\text{Cr}_2\text{O}_3$ the following conclusions can be made.

i. Optical absorption spectra showed two broad bands (16025 and 23474 cm^{-1}) due to spin-allowed transitions that were assigned to ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F)$ and to ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(F)$ transitions. The ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{2g}(F)$ transition revealed that the site symmetry of Cr^{3+} was either C_{4v} or C_{3v} . The unresolved broad band corresponding to 28011 cm^{-1} was assigned to the ${}^4A_{2g}(F) \rightarrow {}^4T_{1g}(P)$ transition.

ii. The value of Dq/B around 2.0 (which is less than 2.3) indicated that Cr^{3+} ions were

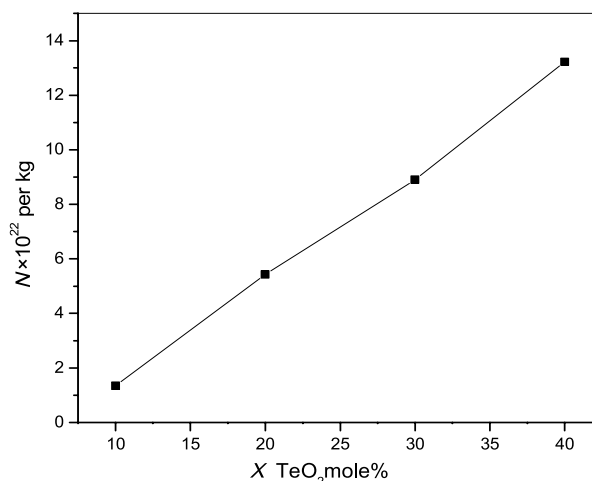


Fig. 8. The concentration of spins N for the resonance signal at $g \approx 1.98$ as a function of TeO_2 concentration

in the weak-field ligand sites. The increase in nephelauxetic (h) values indicated the increasing ionic nature between Cr^{3+} and its ligands in the glass.

iii. The decrease of the energy gap from 1.96 to 1.86 eV for indirect band transitions and from 3.15 to 3.05 eV for direct band transitions was attributed to the structure of the resulting glasses becoming less ordered. The increase in TeO_2 concentration results in the breaking of the regular structure of borotellurite glasses and, hence, is responsible for the decrease in the energy gap.

iv. The resonance signal at $g = 4.80$ was attributed to isolated Cr^{3+} centers in strongly distorted octahedral sites. The resonance signal at $g = 1.98$ was assigned to Cr^{3+} centers at axially distorted octahedral sites.

v. In addition to this, two more resonance signals at $g = 4.26$ and $g = 1.91$ were also observed. The resonance signal at $g = 4.26$ was assigned to the presence of unwanted impurity Fe^{3+} ions, and the resonance signal at $g = 1.91$ indicated the $\text{Cr}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$ exchange-coupled pairs.

REFERENCES

- [1] G.A. Thomas, D.A. Ackerman, P.R. Prucnal, S.L. Cooper, Physics in the whirlwind of optical communications, Physics Today. 53 (9) (2000) 3036.
- [2] D. Cotter, R.J. Manning, K.J. Blow, A.D. Ellis, A.E. Kelly, D. Nasset, I.D. Phillips, A.J. Poustie, D.C. Rogers, Nonlinear optics for high-speed digital information processing, Science. 286 (5444) (1999) 1523–1528.
- [3] M. Yamane, Y. Asahara, Glasses for



photonics. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

[4] **R.L. Sutherland**, Handbook of nonlinear optics, Dekker, New York, 1996.

[5] **M.E. Lines**, Oxide glasses for fast photonic switching: A comparative study, Journal of Applied Physics. 69 (10) (1991) 6876–6884.

[6] **A.J. Marker, N. Neuroth**, The properties of optical glass, Ed. by H. Bach, N. Neuroth. Springer-Verlag, Berlin, 1995.

[7] **P. Becker**, Borate materials in nonlinear optics, Advanced Materials. 10 (1998) 979.

[8] **D.L. Griscom**, Borate glasses, in: Mater. Sci. Res. Vol. 12, Ed. by L.D. Pye, V.D. Frechette, N.J. Kreidle, Plenum Press, New York, 1978, 36 p.

[9] **R.A.H. El-Mallawany**, Tellurite glasses handbook. Physical properties and data. CRC Press, Boca Raton, 2002.

[10] **F. Rasheed, K.P. O'Donnell, B. Henderson, D. Hollis**, Disorder and the optical spectroscopy of Cr^{3+} -doped glasses. II. Glasses with high and low ligand fields, J. Phys.: Cond. Matter. 3 (21) (1991) 3825.

[11] **B. Henderson, M. Yamaga, Y. Gao, K.P. O'Donnell**, Disorder and nonradiative decay of Cr^{3+} -doped glasses, Phys. Rev. B. 46 (2) (1992) 652.

[12] **S.M. Kaczmarek**, $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ glasses doped with Cr, Co, Eu and Dy, Opt. Mater. 19 (1) (2002) 189.

[13] **R.V.V.S.N. Ravikumar, K. Kayalvizhi, A.V. Chandrasekhar, Y.P. Reddy, J. Yamauchi, K. Arunakumari, P.S. Rao**, Strontium tetraborate glasses doped with transition metal ions: EPR and optical absorption study, Appl. Magn. Reson. 33 (1) (2008) 185.

[14] **S. Inaba, S. Fujino**, Empirical equation for calculating the density of oxide glasses, J. Am. Ceram. Soc. 93 (1) (2010) 217.

[15] **B. Edlen**, The refractive index of air, Metrologia. 2 (2) (1966) 71.

[16] **B. Henderson, G.F. Imbush**, Optical spectroscopy of inorganic solids, Clarendon Press, Oxford, 1989.

[17] **U. Fano**, Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts, Phys. Rev. 124 (1961) 1866.

[18] **M.D. Sturge, J. Guggenheim, M.H.L. Pryle**, Antiresonance in the optical spectra of transition-metal ions in crystals, Phys. Rev. B. 2 (7) (1970) 2459.

[19] **S.A. Payne, L.L. Chase, W.F. Kropke**, Optical properties of Cr^{3+} in fluorite-structure hosts and in MgF_2 , J. Chem. Phys. 86 (6) (1987) 3455.

[20] **V. Ramesh Kumar, J. Lakshmana Rao, N.O. Gopal**, EPR and optical absorption studies of Cr^{3+} ions in alkaline earth alumino-borate glasses, J.

Mater. Sci. 41 (7) (2006) 2045.

[21] **R.V.S.S.N. Ravikumar, R. Komatsu, K. Ikeda, A.V. Chandrasekhar, B.J. Reddy, Y.P. Reddy, P.S. Rao**, EPR and optical studies on transition metal doped LiRbB_4O_7 glasses, Journal of Phys. and Chem. of Sol. 64 (2) (2003) 261–264.

[22] **B.V. Padlyak, W. Ryba-Romanowski, R. Lisiecki, V.T. Adamiv, Ya.V. Burak, I.M. Teslyuk**, Synthesis, EPR and optical spectroscopy of the Cr-doped tetraborate glasses, Optical Materials. 34 (12) (2012) 2112–2119.

[23] **M. Haouari, H. Ben Ouada, H. Maaref, H. Hommel, A.P. Legrand**, Optical absorption and electron paramagnetic resonance study of Cr^{3+} -doped phosphate glasses, J. Phys.: Cond. Matter. 9 (31) (1997) 6711.

[24] **C.R. Kesavulu, R.P.S. Chakradhar, C.K. Jayasankar, J. Lakshmana Rao**, EPR, optical, photoluminescence studies of Cr^{3+} ions in $\text{Li}_2\text{O}-\text{Cs}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ glasses – An evidence of mixed alkali effect, Journal of Molecular Structure. 975 (1–3) (2010) 93–99.

[25] **E.A. Davis, N.F. Mott**, Conduction in non-crystalline systems V. Conductivity, optical absorption and photoconductivity in amorphous semiconductors, Philos. Mag. 22 (179) (1970) 903.

[26] **L.E. Alarcon, A. Arrieta, E. Camps, S. Muhl, S. Rudil, E.V. Santiago**, An alternative procedure for the determination of the optical band gap and thickness of amorphous carbon nitride thin films, Applied Surface Science. 254 (1) (2007) 412–415.

[27] **N.F. Mott, E.A. Davis**, Electronic processes in non-crystalline materials, Oxford University Press, London, 1971, p. 293.

[28] **V. Dimitrov, S. Sakka**, Electronic oxide polarizability and optical basicity of simple oxides. I, J. Appl. Phys. 79 (3) (1996) 1736–1740.

[29] **S. Lakshmi Reddy, T. Endo and G. Siva Reddy**, Electronic (absorption) spectra of 3d transition metal complexes, Advanced Aspects of Spectroscopy, ed. by Muhammad Akhyar Farrukh, InTech, 2012.

[30] **B.V. Padlyak, A. Gutsze**, EPR study of the impurity paramagnetic centres in $(\text{CaO}-\text{Ga}_2\text{O}_3-\text{GeO}_2)$ glasses, Appl. Magn. Reson. 14 (1) (1998) 59.

[31] **R.J. Landry, G.T. Fournier, C.G. Young**, Electron spin resonance and optical absorption studies of Cr^{3+} in the phosphate glass, J. Chem. Phys. 46 (4) (1967) 1285.

[32] **D.L. Griscom**, Characterization of three E' -center variants in X- and γ -irradiated high purity $\alpha\text{-SiO}_2$, J. Non-Cryst. Solids. 40 (2–3) (1980) 21.

[33] **G. Little Flower, M. Srinivasa Reddy, G. Sahaya Baskaran, N. Veeraiah**, The structural influence of chromium ions in lead gallium

phosphate glasses by means of spectroscopic studies, *Opt. Mater.* 30 (3) (2007) 357.

[34] **C. Leign, J.Y. Buzare, J. Emery, C. Jacoboni**, Electron paramagnetic resonance determination of the local field distribution acting on Cr^{3+} and Fe^{3+} in transition metal fluoride glasses (TMFG), *J. Phys. Condens. Matter.* 7 (20) (1995) 3853.

[35] **R.P. Sreekanth Chakradhar, J. Lakshmana Rao, G. Sivaramaiah, N.O. Gopal**, Chromium ions in alkali lead borotellurite glasses – An EPR and optical study, *Phys. Status Solidi (b)*. 242 (14) (2005) 2919.

[36] **I. Ardelean, S. Filip**, EPR and magnetic investigations of chromium ions in TeO_2 based glasses, *J. Opt. Adv. Mater.* 7 (2) (2005) 745.

[37] **M. Casalboni, V. Ciafardone, G. Giuli, B. Izzi, E. Paris, P. Proposito**, An optical study of silicate glass containing Cr^{3+} and Cr^{6+} ions, *J. Phys. Condens. Matter.* 8 (1996) 9059.

[38] **J. Santhan Kumar, J. Lakshmi Kumar, M. Subba Rao, Sandhya Cole**, An optical study of silicate glass containing and ions, *Optical Materials.* 35 (2013) 1320–1326.

[39] **J.A. Weil, J.R. Bolton, J.E. Wertz**, Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications, John Wiley, New York, 1994.

[40] **N.W. Ashcroft, N.D. Mermin**, Solid state physics, Harcourt College Publishers, New York, 2001.

Received 09.04.2016, accepted 01.10.2017.

THE AUTHORS

SAMDANI Mohammed

Salalah College of Technology

Thumrait Rd, Thumrayt St, Salalah 211, Oman
samdanimohd82@gmail.com

RAMADEVUDU Gokarakonda

Vasavi College of Engineering

9-5-81, Ibrahim Bagh, Hyderabad, Telangana 500031, India
dr.ramdev@gmail.com

CHARY M. Narasimha

Osmania University

Osmania University, Main Rd, Amberpet, Hyderabad, Telangana 500007, India
mnchary_phy@rediffmail.com

SHAREEFUDDIN Mohammed

Osmania University

Osmania University, Main Rd, Amberpet, Hyderabad, Telangana 500007, India
shareef1775@gmail.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Thomas G.A., Ackerman D.A., Prucnal P.R., Cooper S.L.** Physics in the whirlwind of optical communications // *Physics Today*. 2000. Vol. 53. No. 9. P. 3036.

2. **Cotter D., Manning R.J., Blow K.J., Ellis A.D., Kelly A.E., Nesses D., Phillips I.D., Poustie A.J., Rogers D.C.** Nonlinear optics for high-speed digital information processing // *Science*. 1999. Vol. 286. No. 5444. Pp. 1523–1528.

3. **Yamane M., Asahara Y.** Glasses for photonics. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

4. **Sutherland R.L.** Handbook of nonlinear optics. New York: Dekker, 1996.

5. **Lines M.E.** Oxide glasses for fast photonic switching: A comparative study // *Journal of Applied*

Physics. 1991. Vol. 69. No. 10. Pp. 6876–6884.

6. **Marker A.J., Neuroth N.** The properties of optical glass. Ed. by Bach H., Neuroth N. Berlin: Springer-Verlag, 1995.

7. **Becker P.** Borate materials in nonlinear optics // *Advanced Materials*. 1998. Vol. 10. P. 979.

8. **Griscom D.L.** Borate glasses, in: *Mater. Sci. Res. Vol. 12*. Ed. by Pye L.D., Frechette V.D., Kreidle N.J. New York: Plenum Press, 1978. 36 p.

9. **El-Mallawany R.A.H.** Tellurite glasses handbook. Physical properties and data. Boca Raton: CRC Press, 2002.

10. **Rasheed F., O'Donnell K.P., Henderson B., Hollis D.** Disorder and the optical spectroscopy of Cr^{3+} -doped glasses. II. Glasses with high and low



ligand fields // *J. Phys.: Cond. Matter.* 1991. Vol. 3. No. 21. P. 3825.

11. **Henderson B., Yamaga M., Gao Y., O'Donnell K.P.** Disorder and nonradiative decay of Cr³⁺-doped glasses // *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 46. No. 2. P. 652.

12. **Kaczmarek S.M.** Li₂B₄O₇ glasses doped with Cr, Co, Eu and Dy // *Opt. Mater.* 2002. Vol. 19. No. 1. P. 189.

13. **Ravikumar R.V.V.S.N., Kayalvizhi K., Chandrasekhar A.V., Reddy Y.P., Yamauchi J., Arunakumari K., Rao P.S.** Strontium tetraborate glasses doped with transition metal ions: EPR and optical absorption study // *Appl. Magn. Reson.* 2008. Vol. 33. No. 1. P. 185.

14. **Inaba S., Fujino S.** Empirical equation for calculating the density of oxide glasses // *J. Am. Ceram. Soc.* 2010. Vol. 93. No. 1. P. 217.

15. **Edlen B.** The refractive index of air // *Metrologia.* 1966. Vol. 2. No. 2. P. 71.

16. **Henderson B., Imbush G.F.** Optical spectroscopy of inorganic solids. Oxford: Clarendon Press, 1989.

17. **Fano U.** Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // *Phys. Rev.* 1961. Vol. 124. P. 1866.

18. **Sturge M.D., Guggenheim J., Pryle M.H.L.** Antiresonance in the optical spectra of transition-metal ions in crystals // *Phys. Rev. B.* 1970. Vol. 2. No. 7. P. 2459.

19. **Payne S.A., Chase L.L., Kropke W.F.** Optical properties of Cr³⁺ in fluorite-structure hosts and in MgF₂ // *J. Chem. Phys.* 1987. Vol. 86. No. 6. P. 3455.

20. **Ramesh Kumar V., Lakshmana Rao J., Gopal N.O.** EPR and optical absorption studies of Cr³⁺ ions in alkaline earth alumino-borate glasses // *J. Mater. Sci.* 2006. Vol. 41. No. 7. P. 2045.

21. **Ravikumar R.V.S.S.N., Komatsu R., Ikeda K., Chandrasekhar A.V., Reddy B.J., Reddy Y.P., Rao P.S.** EPR and optical studies on transition metal doped LiRbB₄O₇ glasses // *Journal of Phys. and Chem. of Sol.* 2003. Vol. 64. No. 2. Pp. 261–264.

22. **Padlyak B.V., Ryba-Romanowski W., Lisiecki R., Adamiv V.T., Burak Ya.V., Teslyuk I.M.** Synthesis, EPR and optical spectroscopy of the Cr-doped tetraborate glasses // *Optical Materials.* 2012. Vol. 34. No. 12. Pp. 2112–2119.

23. **Haouari M., Ben Ouada H., Maaref H., Hommel H., Legrand A.P.** Optical absorption and electron paramagnetic resonance study of Cr³⁺-doped phosphate glasses // *J. Phys.: Cond. Matter.* 1997. Vol. 9. No. 31. P. 6711.

24. **Kesavulu C.R., Chakradhar R.P.S., Jayasankar C.K., Lakshmana Rao J.** EPR, optical,

photoluminescence studies of Cr³⁺ ions in Li₂O-Cs₂O-B₂O₃ glasses – An evidence of mixed alkali effect // *Journal of Molecular Structure.* 2010. Vol. 975. No. 1–3. Pp. 93–99.

25. **Davis E.A., Mott N.F.** Conduction in non-crystalline systems V. Conductivity, optical absorption and photoconductivity in amorphous semiconductors // *Philos. Mag.* 1970. Vol. 22. No. 179. P. 903.

26. **Alarcon L.E., Arrieta A., Camps E., Muhl S., Rudil S., Santiago E.V.** An alternative procedure for the determination of the optical band gap and thickness of amorphous carbon nitride thin films // *Applied Surface Science.* 2007. Vol. 254. No. 1. Pp. 412–415.

27. **Mott N.F., Davis E.A.** Electronic processes in non-crystalline materials. London: Oxford University Press, 1971. 293 p.

28. **Dimitrov V., Sakka S.** Electronic oxide polarizability and optical basicity of simple oxides. I. // *J. Appl. Phys.* 1996. Vol. 79. No. 3. Pp. 1736–1740.

29. **Lakshmi Reddy S., Endo T., Siva Reddy G.** Electronic (absorption) spectra of 3d transition metal complexes // *Advanced Aspects of Spectroscopy.* Ed. by M.A. Farukh. InTech. 2012.

30. **Padlyak B.V., Gutsze A.** EPR study of the impurity paramagnetic centres in (CaO-Ga₂O₃-GeO₂) glasses // *Appl. Magn. Reson.* 1998. Vol. 14. No. 1. P. 59.

31. **Landry R.J., Fournier G.T., Young C.G.** Electron spin resonance and optical absorption studies of Cr³⁺ in a phosphate glass // *J. Chem. Phys.* 1967. Vol. 46. No. 4. P. 1285.

32. **Griscom D.L.** Characterization of three E'-center variants in X- and γ-irradiated high purity α-SiO₂ // *J. Non-Cryst. Solids.* 1980. Vol. 40. No. 2–3. P. 21.

33. **Little Flower G., Srinivasa Reddy M., Sahaya Baskaran G., Veeraiah N.** The structural influence of chromium ions in lead gallium phosphate glasses by means of spectroscopic studies // *Opt. Mater.* 2007. Vol. 30. No. 3. P. 357.

34. **Leign C., Buzare J.Y., Emery J., Jacoboni C.** Electron paramagnetic resonance determination of the local field distribution acting on Cr³⁺ and Fe³⁺ in transition metal fluoride glasses (TMFG) // *J. Phys. Condens. Matter.* 1995. Vol. 7. No. 20. P. 3853.

35. **Sreekanth Chakradhar R.P., Lakshmana Rao J., Sivaramaiah G., Gopal N.O.** Chromium ions in alkali lead borotellurite glasses – An EPR and optical study // *Phys. Status Solidi (b).* 2005. Vol. 242. No. 14. P. 2919.

36. **Ardelean I., Filip S.** EPR and magnetic investigations of chromium ions in TeO₂ based glasses

// J. Opt. Adv. Mater. 2005. Vol. 7. No. 2. P. 745.

37. **Casalboni M., Ciafardone V., Giuli G., Izzi B., Paris E., Proposito P.** An optical study of silicate glass containing Cr^{3+} and Cr^{6+} ions // J. Phys. Condens. Matter. 1996. Vol. 8. P. 9059.

38. **Santhan Kumar J., Lakshmi Kumar J., Subba Rao M., Cole S.** An optical study of silicate glass containing and ions // Optical Materials. 2013.

Vol. 35. Pp. 1320–1326.

39. **Weil J.A., Bolton J.R., Wertz J.E.** Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications. New York: John Wiley, 1994.

40. **Ashcroft N.W., Mermin N.D.** Solid state physics. New York: Harcourt College Publishers, 2001.

Статья поступила в редакцию 09.04.2017, принята к публикации 01.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САМДАНИ Мохаммед — сотрудник кафедры инженерных наук Технологического колледжа, г. Салала, Оман.

Thumrait Rd, Thumrayt St, Salalah 211, Oman
samdanimohd82@gmail.com

РАМАДЕВУДУ Гокараконда — сотрудник кафедры физики Инженерного колледжа Васави, г. Хайдарабад, Индия.

9-5-81, Ibrahim Bagh, Hyderabad, Telangana 500031, India
dr.ramdev@gmail.com

ЧАРИ М. Нарасимха — сотрудник кафедры физики Османского университета, г. Хайдарабад, Индия.

Osmania University, Main Rd, Amberpet, Hyderabad, Telangana 500007, India
mnchary_phy@rediffmail.com

ШАРИФУДДИН Мохаммед — сотрудник кафедры физики Османского университета, г. Хайдарабад, Индия.

Osmania University, Main Rd, Amberpet, Hyderabad, Telangana 500007, India
shareef1775@gmail.com



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.18721/JPM.10402

УДК 532.542.4

ВИХРЕРАЗРЕШАЮЩЕЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ В КАНАЛЕ С РЕЗКИМ ПОВОРОТОМ НА 180 ГРАДУСОВ

Д.О. Панов, В.В. Рис, Е.М. Смирнов

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

Методами LES-WALE и IDDES с применением кода ANSYS Fluent 16.2 выполнены расчеты течения в U -образном канале квадратного сечения ($R_{cl}/D_h = 0,65$). Результаты сопоставительных расчетов, проведенных для числа Рейнольдса $Re = 40000$ указанными методами, хорошо согласуются между собой. Для валидационных расчетов при $Re = 100000$, в условиях широко известных тестовых экспериментов, использован более экономичный метод IDDES. Проанализировано влияние толщины пограничного слоя перед входом в поворот на поле течения. Расчетное поле осредненной скорости оказалось в удовлетворительном согласии с опытными данными; вычисленные и измеренные потери давления полностью совпали. Сделан вывод о том, что основная причина оставшихся расхождений между данными расчетов и измерений поля скорости заключается в невозможности достичь полного соответствия постановки вычислительной задачи условиям эксперимента, а именно — по согласованности условий на входной границе.

Ключевые слова: U -образный канал; турбулентное течение; численное моделирование; LES; IDDES

Ссылка при цитировании: Панов Д.О., Рис В.В., Смирнов Е.М. Вихреразрешающее численное моделирование трехмерного турбулентного течения в канале с резким поворотом на 180 градусов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10 № 4. С. 21–33. DOI: 10.18721/JPM.10402

EDDY RESOLVING NUMERICAL SIMULATION OF 3D TURBULENT FLOW IN A 180-DEGREE BEND OF STRONG CURVATURE

D.O. Panov, V.V. Ris, E.M. Smirnov

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

The paper covers LES-WALE and IDDES data obtained with ANSYS Fluent 16.2 for turbulent flow in a strongly curved U -duct of square section ($R_{cl}/D_h = 0.65$). Results of comparative computations performed with two approaches for $Re = 40000$ are in a good agreement. For validation study at a higher Reynolds number, $Re = 100000$, performed under conditions of the well known tests (Cheah et al., 1996; Iacovides et al., 1998), the IDDES approach is used as a resource-saving one. Parametric computations cover analysis of inlet boundary layer thickness on the flow field. The

mean velocity field computed is in a satisfactory agreement with the experimental data, and the calculated pressure losses coincide completely with the measured one. The main cause of remaining discrepancies between the calculated and measured velocity field data lies in impossibility to achieve a full accordance of a computational task setting to the test conditions, namely in the part concerning accordance of inlet conditions.

Key words: *U*-duct; turbulent flow; numerical simulation; LES; IDDES

Citation: Panov D.O., Ris V.V., Smirnov E.M. Eddy resolving numerical simulation of a 3D turbulent flow in a 180-degree bend of strong curvature, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 21–33. DOI: 10.18721/JPM.10402

Введение

Каналы с изгибом на 180° , называемые также *U*-образными, характерны для систем конвективного охлаждения лопаток газовых турбин и проточных элементов теплообменных аппаратов. Весьма часто встречаются *U*-образные каналы с резким поворотом потока, когда радиус закругления стенки на внутренней стороне поворота меньше поперечного размера канала. Турбулентному течению в таком канале присуще особо сложное поведение, которое определяется, с одной стороны, взаимодействием возникающего на повороте интенсивного вторичного (поперечного) течения с обширным, весьма протяженным отрывом, а, с другой стороны, сильно неравновесной турбулентностью, развивающейся в условиях такого взаимодействия.

Интегральные и локальные характеристики турбулентного потока в каналах с резким поворотом на 180° исследуются экспериментально и методом численного моделирования в течение достаточно продолжительного времени. При этом особое внимание уделяется случаю канала квадратного сечения. Работа [1] содержит обширные данные о потерях давления на повороте прямоугольных каналов с различным отношением сторон поперечного сечения. Эти данные непосредственно использованы в соответствующем разделе широко известного справочника по гидравлическим сопротивлениям [2]. Для канала квадратного сечения в работе [1] исследованы потери давления в диапазоне значений числа Рейнольдса $Re = (5 - 30) \cdot 10^4$ ($Re = U_b \cdot H / \nu$, U_b – среднерасходная скорость, H – поперечный размер, ν – кинематическая вязкость

среды) и для относительных радиусов r закругления внутренней стенки в диапазоне $r/H = 0,01 - 1,0$.

В работе [3] приводятся данные о потерях давления в канале с радиусом средней линии поворота $R_{CL} = 0,65H$ ($r/H = 0,15$) в диапазоне $Re = (2 - 6) \cdot 10^4$. Результаты этих работ позволяют заключить, что в случае канала с резким поворотом коэффициент потерь давления практически перестает зависеть от числа Рейнольдса, начиная со значения $Re = 10^5$. При меньших числах Рейнольдса коэффициент потерь давления следует зависимости

$$\zeta = 8,71 \cdot Re^{0,154},$$

где $\zeta = 2\Delta P / (\rho U_b^2)$ (ΔP – перепад статического давления между сечениями канала на прямых участках перед и за поворотом, ρ – плотность) [3].

В работе [3] представлены также расчетные значения ζ , полученные на основе численного моделирования с применением URANS- и LES-подходов. Показано, что в диапазоне $Re = (2 - 6) \cdot 10^4$ результаты расчетов в случае использования LES-подхода с подсеточной моделью WALE [4] удовлетворительно совпадают с данными собственного эксперимента и данными работы [1].

В работах [5 – 7] детально исследована структура течения в неподвижном и вращающемся *U*-образном канале ($R_{CL}/H = 0,65$) квадратного сечения при $Re = 10^5$. Работы [5, 6] содержат результаты экспериментального исследования структуры течения непосредственно перед поворотом, в повороте и за ним, включая отрывную зону, с помощью лазерного доплеровского измерителя скорости (ЛДИС). В работе [7], продолжающей работы [5, 6], представлены также экспери-



ментальные данные о распределении коэффициента давления вдоль плоской (торцевой) стенки канала.

Результаты работ [5 – 7] широко используются в качестве тестовых для валидации различных подходов к численному моделированию структуры турбулентного течения в *U*-образных каналах с резким поворотом потока [8 – 12]. Работы [8 – 10] и ряд других показывают, что использование RANS-подхода с моделями изотропной турбулентной вязкости не позволяет получить удовлетворительного согласования с экспериментальными данными [5 – 7].

В работах [9, 11] представлены результаты расчетов полей скорости, полученные при использовании RANS-подхода с моделями рейнольдсовых напряжений (Second Moment Closure, SMC). По данным из этих работ можно заключить, что среди моделей рейнольдсовых напряжений наилучшие результаты дает низкорейнольдсовая модель TCL SMC (Two-Component-Limit SMC) [13]. Тем не менее, и эта модель существенно недооценивает протяженность отрывной области на выходе из поворота [11], по крайней мере, в случае неподвижного канала.

Дальнейший прогресс в повышении качества предсказательных расчетов рассматриваемого типа течений связывается с применением вихреразрешающих подходов. Авторы работы [12] проводили вычисления на основе (LES-WALE)-подхода в сочетании с методом пристенных функций (вычислительная модель из семейства Wall-Modeling LES). В случае неподвижного канала результаты этих вычислений лучше согласуются с данными экспериментов [5, 6], чем данные расчетов, выполненных в работе [11] по модели TCL SCM. Вместе с тем, остаются существенные расхождения расчетных и экспериментальных профилей скорости, особенно в сечении, расположенном несколько ниже по потоку от отрывной области.

Общий анализ результатов, представленных в работах [11, 12], приводит к заключению, что причинами оставшихся расхождений между данными расчетов и измерений поля скорости в тестовой конфигурации [5, 6] могут быть не только погрешности

измерений, несовершенство модели турбулентности и сеточная чувствительность численного решения, но и неполное соответствие постановки вычислительной задачи условиям эксперимента. Прежде всего, это касается неопределенностей в задании условий на входе в расчетную область. К сожалению, данные измерений [5, 6] для сечения, расположенного выше по потоку от поворота и служащего входным сечением в расчетных моделях, ограничены лишь тремя профилями продольной скорости. Более того, эти профили несимметричны, с различной толщиной пристенных пограничных слоев на противоположных стенках. Все это приводит к невозможности достаточно полной реконструкции входных условий и к некоторому произволу даже в выборе начальной толщины пограничного слоя. Как следствие, возникает вопрос о чувствительности результатов численного моделирования к заданию толщины пограничного слоя на входе в расчетную область.

В настоящей работе этот вопрос изучается применительно к условиям экспериментов [5 – 7] посредством численного моделирования на основе метода IDDES [14, 15]. Последний является гибридным незональным RANS/LES-методом, который позволяет проводить вихреразрешающие расчеты турбулентных течений, ограниченных стенками, при высоких числах Рейнольдса и на ресурсах с существенно меньшей (по сравнению с «чистым» LES) вычислительной производительностью.

Изложению результатов IDDES-расчетов для числа Рейнольдса, равного 10^5 и отвечающего условиям экспериментов [5 – 7], предшествует представление данных сопоставительных расчетов по методам IDDES и LES-WALE, выполненных при числе Рейнольдса, уменьшенном до значения $4 \cdot 10^4$. Все расчеты проводились с использованием программного пакета вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent 16.2 [16].

Постановка задачи и вычислительные аспекты

Геометрическая модель *U*-образного канала, для которого экспериментально исследована структура течения [5 – 7], представ-

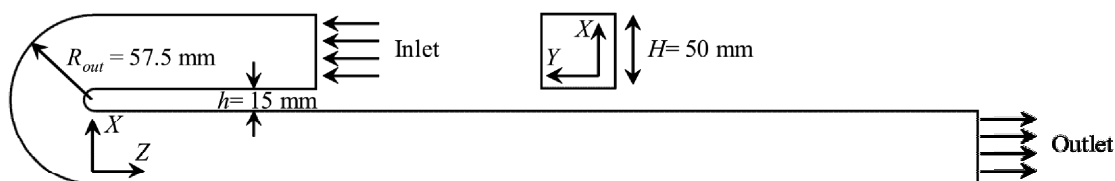


Рис. 1. Геометрия моделируемой части U-образного канала

лена на рис. 1. Измерения распределений продольной компоненты скорости в области, лежащей выше по потоку от поворота, проводились [5, 6] в поперечном сечении канала, расположенном на расстоянии $3H$ вверх по потоку от поворота ($Z/H = -3$). На рис. 1 это сечение показано как входное, таким же оно было принято при постановке задачи численного моделирования. Выходное сечение канала помещено нами на расстоянии 10 калибров от поворота ($Z/H = 10$), что близко к условиям экспериментов. Ось Z совпадает с осью канала на прямых участках и направлена в ту же сторону, что и поток. Значение $Z = 0$ соответствует плоскости, отделяющей прямые участки канала от участка поворота.

Входная скорость и характеристики турбулентности определялись в результате вспомогательных расчетов развивающегося течения в длинном прямолинейном квадратном канале, проведенных на основе RANS-подхода с моделью турбулентности $k-\omega$ SST. Исходно цель этих расчетов заключалась в получении распределений, наиболее соответствующих экспериментальным данным [5, 6] для первого измерительного сечения ($Z/H = -3$). Здесь, однако, встретились трудности, связанные с отмеченной выше несимметричностью экспериментальных профилей скорости, в то время как числен-

ное решение обладает симметрией относительно двух срединных плоскостей. В итоге были выбраны два варианта входных распределений, первый из которых соответствует начальной (при $Z/H = -3$) толщине пограничного слоя $\delta = 0,1H$ (в срединных плоскостях), а второй — значению $\delta = 0,2H$. Как будет показано ниже, первое из выбранных значений начальной толщины пограничного слоя соответствует результатам измерений профиля скорости у одной из стенок, а второе — экспериментальному профилю у противоположной стенки. Величина δ оценивалась как расстояние от стенки до точки со значением скорости, равным 0,99 от максимальной скорости в сечении. В выходном сечении канала задавалось постоянное давление, на стенках канала — условие прилипания.

Из возможностей, предоставляемых пакетом ANSYS Fluent 16.2 по вихреразрешающему численному моделированию, в настоящей работе предпочтение было отдано методу LES с подсеточной моделью WALE [4] и гибриднему подходу IDDES (в версии работы [15]). Для создания на входной границе турбулентного контента, необходимого при расчетах по методам LES и IDDES, на этой границе генерировались стохастические вихри, посредством активации опции “Vortex method” [16].

Таблица 1

Основные характеристики расчетных сеток для вихреразрешающих подходов

№ сетки	Подход	Re	$N_{cell} \cdot 10^{-6}$	$\delta X^+, \delta Y^+$	δZ^+
1	LES-WALE	$4 \cdot 10^4$	16,2	20	40
2	IDDES	$4 \cdot 10^4$	6,9	50	50
3	IDDES	10^5	13,8	125	125

Обозначения: N_{cell} — общее число сеточных элементов; $\delta X^+, \delta Y^+, \delta Z^+$ — нормированные размеры ячеек в ядре потока.



С учетом представленных в работе [3] данных по сеточной чувствительности результатов (LES-WALE)-расчетов течения в канале той же геометрии, в настоящей работе вычисления проводились на трех квазиструктурированных расчетных сетках, состоящих из гексаэдральных элементов. Основные характеристики сеток даны в табл. 1.

Заметим, что сетка 1 была выбрана аналогичной одной из сеток, использованных в работе [3] (сетка 4 в указанном литературном источнике). В табл. 1 для всех расчетных сеток приведены (в нормированных величинах) характерные размеры ячеек, находящихся в ядре потока. Отметим также, что для пристенных ячеек нормированное расстояние от центра ячейки до стенки (X_1^+ или Y_1^+) не превышало единицы во всех представляемых численных решениях.

В работах [5 – 7] экспериментальные данные получены для относительно высокого значения числа Рейнольдса ($Re = 10^5$). При этом значении размерность использованных сеток (см. табл. 1) оказывается недостаточной для корректного применения LES-подхода с подсеточной моделью WALE, хорошо зарекомендовавшего себя, в частности, при проведении расчетов течения в канале данной геометрии при меньших значениях числа Рейнольдса ($Re = (2 - 6) \cdot 10^4$) [3].

В настоящей работе вычисления при $Re = 10^5$ выполнены с использованием более экономичного гибридного IDDES-подхода [14, 15], в котором относительно универсальные мелкомасштабные вихревые структуры, расположенные в пристенной области, моделируются $k-\omega$ SST моделью турбулентности, а крупные вихревые структуры, расположенные на удалении от стенки, разрешаются в рамках LES-подхода. Чтобы дополнительно проверить адекватность результатов, получаемых для течений рассматриваемого типа на основе подхода IDDES, были выполнены сопоставительные расчеты течения в канале той же геометрии при умеренном значении числа Рейнольдса ($Re = 4 \cdot 10^4$) как с использованием подхода LES-WALE, так и IDDES-подхода.

Из возможностей, предоставляемых пакетом ANSYS Fluent 16.2 по настройке вычислительного алгоритма, выбира-

лись следующие опции. Для аппроксимации конвективных слагаемых применена центрально-разностная схема второго порядка. Для аппроксимации производных по времени выбрана трехслойная схема Эйлера. Интерполяции давления на грань расчетной ячейки проводилась по опции, реализующей взвешенную сумму противопоточных схем первого и второго порядков. Расчет градиентов в центрах ячеек проводился по методу, основанному на формуле Гаусса – Грина. Для обеспечения связи уравнений баланса массы и импульса выбрана наиболее быстрая, последовательная схема решения уравнений с условно безытерационным продвижением по времени, а именно – NITA-FSM. Шаг по времени подбирался из условия, согласно которому максимальное значение локального числа Куранта не должно превосходить 0,8. Для получения осредненных характеристик потока статистика накапливалась на протяжении 150000 шагов по времени; перед этим делалось 40000 шагов для выхода на статистически установившийся режим. При инициализации каждого из расчетов, в качестве начального приближения использовались данные, полученные при решении RANS-уравнений, замкнутых по модели турбулентности $k-\omega$ SST.

Обсуждение результатов

Сопоставление решений по методам LES-WALE и IDDES. Расчеты течения с двумя подходами к моделированию турбулентности проводились при значении числа Рейнольдса, составляющем $4 \cdot 10^4$. При этом на входе в канал задавались распределения скорости и характеристик турбулентности, соответствующие начальной толщине пограничного слоя $\delta = 0,2H$.

Анализ полученных данных показал, что сопоставляемые методы вихреразрешающего моделирования для всей расчетной области дают идентичные по структуре и очень близкие в количественном отношении поля осредненной скорости. На рис. 2 сравниваются профили продольной осредненной скорости, построенные по результатам расчетов методами LES-WALE и IDDES для трех поперечных сечений ка-

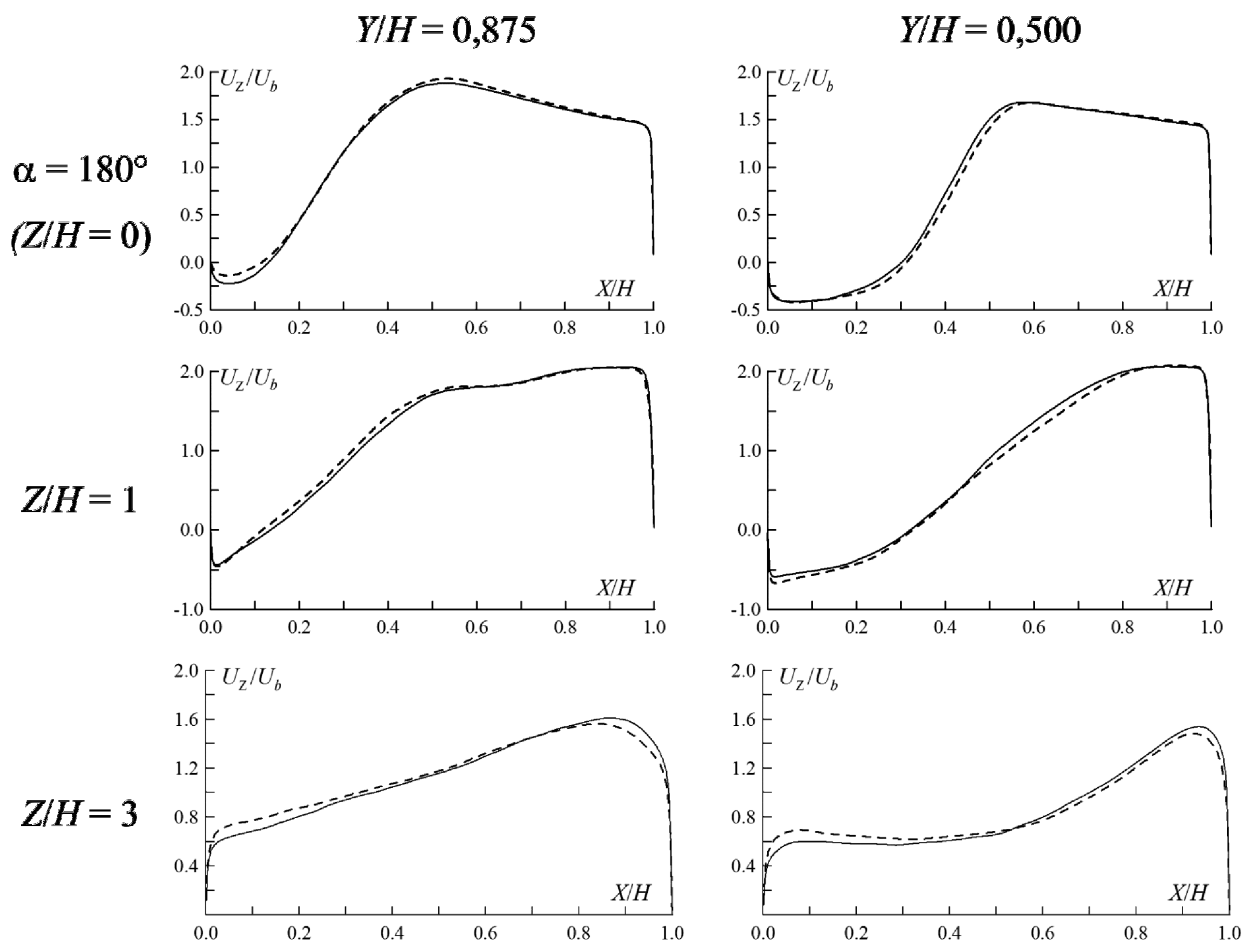


Рис. 2. Профили осредненной продольной компоненты скорости, рассчитанные методами LES-WALE (сплошные линии) и IDDES (штриховые линии); $Re = 4 \cdot 10^4$

нала, расположенных в области $Z/H \geq 0$. Профили даются на линиях, образованных пересечением поперечных сечений с двумя продольными сечениями, параллельными плоским стенкам. Сечение $Y/H = 0,875$ лежит ближе к одной из плоских стенок, а сечение $Y/H = 0,5$ совпадает со срединной плоскостью канала. Сколько-нибудь существенные различия в профилях наблюдаются лишь на участке за поворотом, где средняя разница локальных значений скорости в сходственных точках на профилях достигает 5%.

Более полное представление о различиях в распределениях продольной, нормированной на U_b , скорости в сечении $Z/H = 3$, даваемых методами LES-WALE и IDDES, можно получить из рис. 3. Видно,

что IDDES-подход дает несколько более однородное распределение скорости. Здесь следует отметить, что результаты расчетов для участка течения, расположенного на месте смыкания отрывной области и несколько ниже по потоку (сюда попадает и сечение $Z/H = 3$), оказываются наиболее чувствительными к выбору математической модели, лежащей в основе проводимых вычислений. Это заключение основывается не только на результатах настоящих расчетов, но и на общем анализе результатов более ранних работ, посвященных численному моделированию турбулентного течения в U-образном канале рассматриваемой геометрии [9, 11, 12].

Сопоставляемые подходы к моделированию турбулентности дали близкие результа-

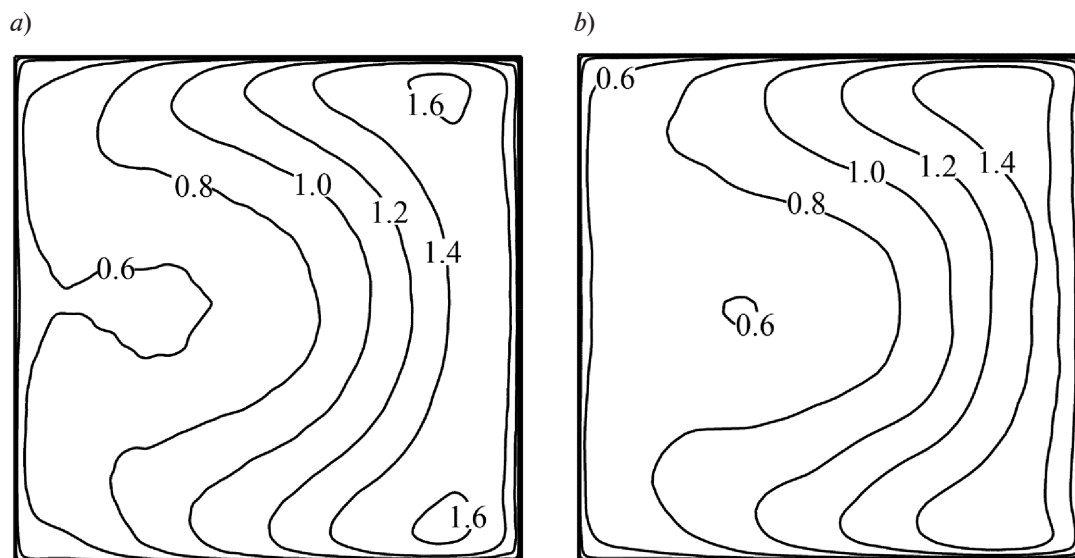


Рис. 3. Изолинии осредненной продольной компоненты скорости U_z/U_b в сечении $Z/H = 3$, рассчитанные методами LES-WALE (a) и IDDES (b); $Re = 4 \cdot 10^4$

ты и для интегральных характеристик. Так, значения коэффициента потерь давления ζ , определенные по разнице статических давлений в сечениях $Z/H = -3,0$ и $8,5$, составили 1,85 в случае расчета методом IDDES и 1,87 — методом LES-WALE.

В целом же, результаты проведенного сопоставительного анализа локальных и интегральных характеристик течения позволяют сделать заключение о хорошей согласованности данных, полученных по двум вихре-разрешающим методам и о целесообразности использования более экономичного IDDES-подхода для моделирования течения при $Re = 10^5$.

Сравнение экспериментальных и расчетных полей скорости для $Re = 10^5$. Как отмечалось выше, при проведении расчетов по методу IDDES при $Re = 10^5$, были выбраны два варианта входных распределений, с различной начальной толщиной пристенных слоев. В верхней части рис. 4 профили скорости, задаваемые в расчетах для входного сечения $Z/H = -3$, сопоставляются с результатами измерений [6] для того же сечения. Можно видеть, что полученное в эксперименте несимметричное распределение скорости в целом соответствует толщине $\delta = 0,1H$ около внешней (относительно изгиба) стенки и значению $\delta = 0,2H$ око-

ло внутренней стенки. Общее превышение входных расчетных значений скорости в ядре потока над экспериментальными значениями, особенно в случае $\delta = 0,2H$, можно связать с двумя факторами.

Во-первых, экспериментальное распределение скорости в сечении $Z/H = -3$ имеет явно выраженную скошенность.

Во-вторых, модель с изотропной вязкостью, использованная для описанных выше вспомогательных расчетов, не способна воспроизводить угловые вторичные течения, характерные для турбулентного течения в прямолинейных каналах прямоугольного сечения [17 – 19], и, соответственно, их выравнивающее действие на распределение скорости в поперечном сечении канала (см., например, работу [20]). Этот недостаток в задании входных распределений, представляется, однако, менее существенным, чем неопределенности в задании начальной толщины пограничного слоя, поскольку течение в области поворота и непосредственно за ним контролируется вторичными течениями другого рода, интенсивность которых зависит, прежде всего, от толщины вязких пограничных слоев на торцевых стенках.

Кроме входных профилей скорости, на рис. 4 приведены профили еще в четырех

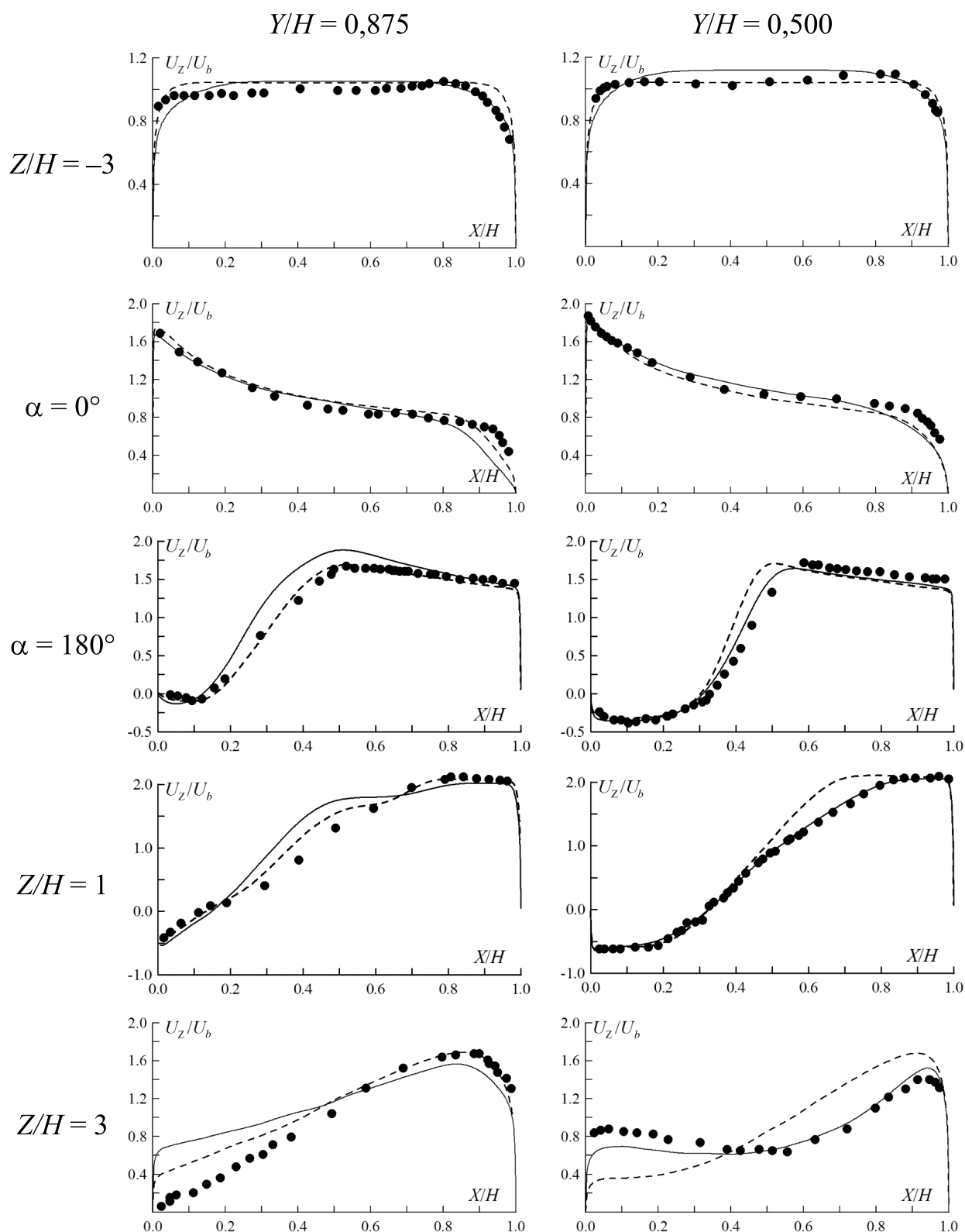


Рис. 4. Профили осредненной продольной компоненты скорости в различных сечениях канала для $Re = 10^3$: экспериментальные данные [6] (символы) и результаты расчетов по методу IDDES при $\delta = 0,1H$ (штриховые линии) и $\delta = 0,2H$ (сплошные линии)

последующих поперечных сечениях: в начале ($\alpha = 0^\circ$) и в конце поворота ($\alpha = 180^\circ$), а также в сечениях с большой долей возвратного течения ($Z/H = 1$) и сразу за отрывной зоной ($Z/H = 3$).

В начале поворота (сечение $\alpha = 0^\circ$) профили скорости, полученные в расчетах для разных входных условий, различаются только в зоне торможения у внешней изогнутой стенки. В сечении $\alpha = 180^\circ$ и последующих сечениях различие в рассчитанных профилях становится более существенным. Наибольшее различие наблюдается в сечении $Z/H = 3$, где профиль скорости для случая $\delta = 0,2H$ оказывается более однородным.

Сравнение результатов расчетов с данными эксперимента приводит к заключению, что расчетные профили скорости в продольном сечении $Y/H = 0,875$ ближе к экспериментальным данным в случае меньшей толщины входного пристенного слоя ($\delta = 0,1H$). Для сечения $Y/H = 0,5$ наблюдается обратная картина: в случае утолщенного входного пристенного слоя ($\delta = 0,2H$) расчетные профили скорости лучше согласуются с экспериментом.

В целом, влияние начальной толщины пограничного слоя, изменяемой в выбранных пределах, на отдельных участках профилей существенно превосходит погрешности измерений, которые в работах [5, 6] оцениваются на уровне 2 % от среднерасходной скорости.

Изменение статического и полного давления вдоль канала. На рис. 5 показаны распределения вдоль канала значений коэффициента давления C_p и локального коэффициента потерь полного давления ξ_{loc} , рассчитанные при $Re = 10^5$ для двух значений толщины пограничного слоя во входном сечении. Там же приведены экспериментальные значения C_p из работы [7]. Величины определены следующим образом:

$$C_p = 2(P_{in} - P_0) / (\rho U_b^2),$$

где P – локальное давление, взятое на средней линии плоской стенки; P_{in} – среднее по площади давление на входе;

$$\xi_{loc} = 2(\langle P_{0,in} \rangle - \langle P_0 \rangle) / (\rho U_b^2),$$

где $\langle P_0 \rangle, \langle P_{0,in} \rangle$ – среднемассовые величины полного давления в текущем сечении и на входе, соответственно.

Вертикальные пунктирные линии на графике соответствуют сечениям канала в начале ($\alpha = 0^\circ$) и в конце ($\alpha = 180^\circ$) поворота.

При сравнении расчетных и экспериментальных распределений коэффициента давления можно заключить, что они находятся в хорошем согласии, особенно в случае $\delta = 0,2H$.

Анализ данных для локального коэффициента потерь полного давления позволяет заметить, что основной прирост потерь происходит в повороте и на участке в четыре калибра за ним.

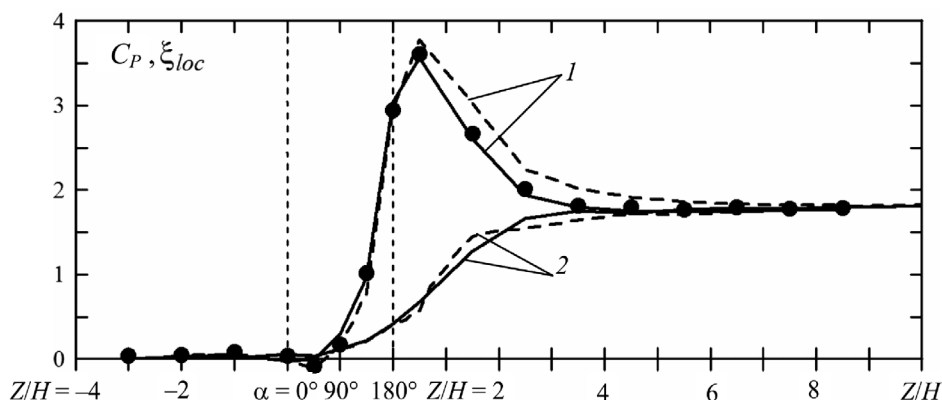


Рис. 5. Распределения вдоль канала локальных значений коэффициента давления C_p (1) и коэффициента потерь полного давления ξ_{loc} (2) для $Re = 10^5$: данные измерений [7] (символы) и результаты расчетов по методу IDDES при $\delta = 0,1H$ (штриховая линия) и $\delta = 0,2H$ (сплошная линия)

Таблица 2

Сравнение расчетных и экспериментальных данных по потерям в канале при $Re = 10^5$

	Толщина пограничного слоя на входе, δ	ζ	ξ
Эксперимент [7]	От $\sim 0,1H$ до $\sim 0,2H$ на разных стенках	1,80	—
Расчеты методом IDDES	0,1H	1,77	1,80
	0,2H	1,82	1,81

Обозначения: ζ и ξ — коэффициенты потерь статического и полного давления.

Как и следовало ожидать, по мере удаления от поворота (вниз по потоку), значения C_p и ξ_{loc} сближаются, при этом наиболее быстро это происходит в случае утолщенного пограничного слоя перед входом в поворот. Можно также видеть, что в обоих расчетных вариантах значения C_p и ξ_{loc} практически совпадают при $Z/H > 8$.

Далее значения C_p при $Z/H = 8,5$ мы будем отождествлять с коэффициентом потерь статического давления ζ , определенным по перепаду давления на прямых участках до и после поворота. В табл. 2 экспериментальные значения ζ , приведенные в работе [7], сопоставляются с нашими расчетными значениями. В таблице также даются расчетные значения коэффициента потерь полного давления ξ , вычисленного по перепаду полных давлений в тех же сечениях, что и при расчете ζ .

Оба значения коэффициента ζ , полученные в расчетах, отличаются от экспериментального менее чем на 2%, при этом экспериментальное значение лежит между двумя расчетными. Вычисленные значения ζ и ξ оказались слабо зависящими от вариации входных условий. Так, различия в коэффициентах потерь давления ζ , полученных для двух толщин входного пограничного слоя, составляют менее 3 %. Различия же в расчетных значениях коэффициента потерь полного давления ξ еще меньше — около 0,5 %.

Заключение

Для отработки методики вихреразрешающего численного моделирования турбулентного течения в канале с резким поворотом на 180° проведены сопоставительные расчеты с использованием метода

моделирования крупных вихрей, в варианте LES-WALE, и метода IDDES из семейства гибридных RANS/LES подходов. При весьма существенном различии в количестве сеточных элементов (около 16 млн. ячеек в случае LES и 7 млн. для IDDES) результаты расчетов, выполненных при значении числа Рейнольдса $Re = 4 \cdot 10^4$, находятся в хорошем согласии. Это дает дополнительную мотивацию к использованию относительно экономичного метода IDDES для проведения расчетов при более высоких значениях числа Рейнольдса.

Расчеты валидационной направленности по методу IDDES выполнены для условий экспериментов [5 — 7], проведенных при $Re = 10^5$ и широко используемых для оценки возможностей разных подходов к моделированию турбулентности в U-образных каналах с резким поворотом потока.

Изучено влияние толщины входного пограничного слоя на поле скорости и потери давления в повороте. Диапазон изменения этого параметра выбран с учетом неполной определенности входных условий в экспериментальном исследовании. В целом получено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных полей скорости, а также практически полное совпадение данных по потерям давления.

Устранение оставшихся расхождений между данными расчетов и измерений поля скорости в рассматриваемой тестовой конфигурации представляется проблематичным, так как при скудности информации, полученной в экспериментах для поля скорости на входной границе, невозможно достичь полного соответствия постановки вычислительной задачи условиям эксперимента.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Веревкин Н.Н.** Гидравлические сопротивления изолированных и составных колен прямоугольного сечения // В сб. «Промышленная аэродинамика: Воздуховоды». Вып. 7. М.: Обorongиз, 1956. С. 25–51.
2. **Идельчик И.Е.** Справочник по гидравлическим сопротивлениям. М.: Машиностроение, 1975. 559 с.
3. **Панов Д.О., Юхнев А.Д.** Потери давления в канале с резким поворотом на 180°: результаты URANS и LES расчетов в сопоставлении с данными измерений // Труды Юбилейной конференции Национального комитета РАН по тепло- и массообмену «Фундаментальные и прикладные проблемы тепломассообмена» и XXI Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева «Проблемы тепло- и массообмена в энергетических установках». (22 – 26 мая 2017 г., СПб). В 2 тт. Т. 1. М.: Издательский дом МЭИ, 2017. С. 236–239.
4. **Nicoud F., Ducros F.** Subgrid-scale stress modeling based on the square of the velocity gradient tensor // Flow, Turbulence and Combustion. 1999. Vol. 62. No. 3. Pp. 183–200.
5. **Cheah S.C., Iacovides H., Jackson D.C., Ji H., Launder B.E.** LDA investigation of the flow development through a rotating U-bend of strong curvature // In: The 5th International Symposium on Refined Flow Modeling and Turbulence Measurements. Paris, 1993. Pp. 269–276.
6. **Cheah S.C., Iacovides H., Jackson D.C., Ji H., Launder B.E.** LDA investigation of the flow development through rotating U-ducts // ASME Journal of Turbomachinery. 1996. Vol. 108. No. 3. Pp. 590–596.
7. **Iacovides H., Jackson D.C., Ji H., Kelemenis G., Launder B.E., Nikas K.-S.** LDA study of flow development through an orthogonally rotating U-bend of strong curvature and rib-roughened walls // ASME Journal of Turbomachinery. 1998. Vol. 118. No. 3. Pp. 386–391.
8. **Bo T., Iacovides H., Launder B.E.** Convective discretization schemes for the turbulence transport equations in flow predictions through sharp U-bends // International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow. 1995. Vol. 5. No. 1. Pp. 33–48.
9. **Iacovides H., Launder B.E., Li H.Y.** The computation of flow development through stationary and rotating U-ducts of strong curvature // International Journal of Heat and Fluid Flow. 1996. Vol. 17. No. 1. Pp. 22–33.
10. **Левченя А.М., Липницкая С.Н.** Оптимизация формы канала квадратного сечения с поворотом на 180° с целью снижения потерь: численное моделирование трехмерного турбулентного течения // Тепловые процессы в технике. 2011. № 12. С. 537–544.
11. **Suga K.** Predicting turbulence and heat transfer in 3D curved ducts by near-wall second moment closures // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2003. Vol. 46. No. 1. Pp. 161–173.
12. **Guleren K.M., Turan A.** Validation of large-eddy simulation of strongly curved stationary and rotating U-duct flows // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2007. Vol. 28. No. 5. Pp. 909–921.
13. **Craft T.J., Launder B.E.** A Reynolds-stress closure designed for complex geometries // International Journal of Heat and Fluid Flow. 1996. Vol. 17. No. 3. Pp. 245–254.
14. **Shur M.L., Spalart P.R., Strelets M.Kh., and Travin A.K.** A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modeled LES capabilities // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2008. Vol. 29. No. 6. Pp. 1638–1649.
15. **Gritskevich M.S., Garbaruk A.V., Schütze J., Menter F.** Development of DDES and IDDES formulations for the $k-\omega$ shear stress transport model // Flow, Turbulence and Combustion. 2012. Vol. 88. No. 3. Pp. 431–449.
16. **ANSYS Fluent Theory Guide.** Release 16.2. ANSYS Inc. 2015.
17. **Nikuradse J.** Untersuchungen über turbulente Strömungen in nicht kreisförmigen Rohren // Ingenieur-Archiv. 1930. Vol. 1. No. 3. Pp. 306–332.
18. **Melling A., Whitelaw J.H.** Turbulent flow in a rectangular duct // Journal of Fluid Mechanics. 1976. Vol. 78. No. 2. Pp. 289–315.
19. **Gessner F.B., Po J.K., Emery A.F.** Measurements of developing turbulent flow in a square duct // In: Durst F., Launder B.E., Schmidt F.W., Whitelaw J.H. (Eds.) Turbulent Shear Flows I. Berlin, Heidelberg: Springer, 1979. Pp. 119–136.

Статья поступила в редакцию 09.10.2017, принята к публикации 31.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАНОВ Дмитрий Олегович — инженер кафедры гидроаэродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

РИС Владимир Вольдемарович — кандидат технических наук, директор НОЦ «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

- [1] N.N. Verevkin, *Gidravlicheskiye soprotivleniya izolirovannykh i sostavnykh kolen pryamougolnogo secheniya* [Hydraulic resistances of isolated and miter bends with rectangular cross-sections], In: *Industrial Aerodynamics: Air Ducts*, Iss. 7, Moscow, Oborongiz (1956) 25–51.
- [2] I.E. Idelchik, *Spravochnik po gidravlicheskim soprotivleniyam* [Reference book on hydraulic resistances], Moscow, Mashinostroyeniye, 1975.
- [3] D.O. Panov, A.D. Yukhnev, *Poteri davleniya v kanale s rezkim povоротом na 180°: rezultaty URANS i LES raschetov v sopostavlenii s dannymi izmereniy* [Pressure losses in the duct turned sharply by 180 degrees: URANS & LES computation results as compared to the measurement data] // *Trudy Yubileynoy konferentsii Natsionalnogo komiteta RAN po teplo- i massoobmenu «Fundamentalnyye i prikladnyye problemy teplomassoobmena» i XXI Shkoly-seminara molodykh uchenykh i spetsialistov pod rukovodstvom akad. RAN A.I. Leontyeva «Problemy teplo- i massoobmena v energeticheskikh ustanovkakh»*. (May 22–26, 2017, St. Petersburg). In 2 vols. Vol. 1, Moscow, MEI Publishers (2017) 236–239.
- [4] F. Nicoud, F. Ducros, *Subgrid-scale stress modeling based on the square of the velocity gradient tensor*, *Flow, Turbulence and Combustion*. 62 (3) (1999) 183–200.
- [5] S.C. Cheah, H. Iacovides, D.C. Jackson, et al., *LDA investigation of the flow development through a rotating U-bend of strong curvature*, In: *The 5th International Symposium on Refined Flow Modeling and Turbulence Measurements*, Paris (1993) 269–276.
- [6] S.C. Cheah, H. Iacovides, Jackson, et al., *LDA investigation of the flow development through rotating U-ducts*, *ASME Journal of Turbomachinery*. 108 (3) (1996) 590–596.
- [7] H. Iacovides, D.C. Jackson, H. Ji, et al., *LDA study of flow development through an orthogonally rotating U-bend of strong curvature and rib-roughened walls* // *ASME Journal of Turbomachinery*. 118 (3) (1998) 386–391.
- [8] Bo T., Iacovides H., Launder B.E. *Convective discretization schemes for the turbulence transport equations in flow predictions through sharp U-bends*, *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*. 5 (1) (1995) 33–48.
- [9] H. Iacovides, B.E. Launder, H.Y. Li, *The computation of flow development through stationary and rotating U-ducts of strong curvature*, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 17 (1) (1996) 22–33.
- [10] A.M. Levchenya, S.N. Lipnitskaya, *Optimizatsiya formy kanala kvadratnogo secheniya s povоротом na 180° s tselyu snizheniya poter: chislennoye modelirovaniye trekhmernogo turbulentnogo techeniya* [Shape optimization for the duct with rectangular cross-section and turned sharply by 180 degrees in order to enhance losses: numerical simulation of 3D turbulent flow], *Thermal Processes in Engineering*. (12) (2011) 537–544.
- [11] K. Suga, *Predicting turbulence and heat transfer in 3D curved ducts by near-wall second moment closures*, *International Journal of Heat Mass Transfer*. 46 (1) (2003) 161–173.
- [12] K.M. Guleren, A. Turan, *Validation of large-eddy simulation of strongly curved stationary and rotating U-duct flows*, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 28 (5) (2007) 909–921.
- [13] T.J. Craft, B.E. Launder, *A Reynolds-stress closure designed for complex geometries*, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 17 (3) (1996) 245–254.
- [14] M.L. Shur, P.R. Spalart, M.Kh. Strelets, A.K. Travin, *A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modeled LES capabilities*, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 29 (6) (2008) 1638–1649.
- [15] M.S. Gritskevich, A.V. Garbaruk, J. Schütze, F. Menter, *Development of DDES and IDDES formulations for the $k-\omega$ shear stress transport model*, *Flow, Turbulence and Combustion*. 88 (3) (2012) 431–449.
- [16] ANSYS Fluent Theory Guide. Release 16.2. ANSYS Inc. 2015.



[17] **J. Nikuradse**, Untersuchungen über turbulente Strömungen in nicht kreisförmigen Rohren, Ingenieur-Archiv. 1 (3) (1930) 306–332.

[18] **A. Melling, J.H. Whitelaw**, Turbulent flow in a rectangular duct, Journal of Fluid Mechanics. 78 (2) (1976) 289–315.

[19] **F.B. Gessner, J.K. Po, A.F. Emery**, Measurements of developing turbulent flow in a square duct // In: F. Durst, B.E. Launder, F.W. Schmidt, J.H. Whitelaw (Eds), Turbulent Shear Flows, I., Springer, Berlin, Heidelberg (1979) 119–136.

Received 09.10.2017, accepted 31.10.2017.

THE AUTHORS

PANOV Dmitriy O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

dopanov@gmail.com

RIS Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

vvris@spbstu.ru

SMIRNOV Evgeniy M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

smirnov_em@spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.10403

UDC 536.24.08

IMPACT OF NANOPARTICLE VOLUME FRACTIONS IN THE WATER-BASED NANOFLUIDS ON THE SQUEEZED MHD NANOFLUID'S FLOW OVER A POROUS SENSOR SURFACE

R. Kandasamy, N.A.B.M. Zailani, F.N.B.J. Fatiha

Research Centre for Computational Mathematics,
Tun Hussein Onn University of Malaysia, Parit Raja, Malaysia

The squeezed MHD flow of water-based metallic nanoparticles over a porous sensor surface in the presence of a heat source has been investigated. The physical significance of the problem is the interaction and the geometry of water-based copper (Cu), alumina (Al_2O_3) and SWCNTs. The governing partial differential equations of momentum and energy were converted into ODEs for assured groups of the controlling parameters. The numerical and analytical solutions of the ODEs were obtained using the fourth or the fifth order Fehlberg method with shooting technique and OHAM and were analyzed. It was found that there was no appreciable difference between them. It was established that, in squeezing flow phenomena, the effect of nanoparticle volume fraction on the (SWCNTs – water) nanofluid in the presence of magnetic field with thermal radiation energy played a dominant role on heat transfer as compared to the other mixtures in the flow regime.

Keywords: nanoparticle volume fraction; squeezed flow; sensor surface; SWCNT; thermal radiation energy

Citation: R. Kandasamy, N.A.B.M. Zailani, F.N.B.J. Fatiha, Impact of nanoparticle volume fractions in the water-based nanofluids on the squeezed MHD nanofluid's flow over a porous sensor surface, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 34–53. DOI: 10.18721/JPM.10403

ВЛИЯНИЕ ОБЪЕМНЫХ ДОЛЕЙ НАНОЧАСТИЦ В ВОДНЫХ НАНОЖИДКОСТЯХ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ СЖИМАЕМОГО МГД-ПОТОКА ЭТИХ ЖИДКОСТЕЙ ПО ПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТИ ДАТЧИКА

Р. Кандасами, Н.А.Б.М. Зайлани, Ф.Н.Б.Дж. Фатиха

Исследовательский центр вычислительной математики
Малайзийского университета Туна Хусейна Онна, г. Парит Раджа, Малайзия

Исследованы сжимаемые магнитогидродинамические (МГД) потоки наножидкостей (вода + наночастицы трех типов) по поверхности пористого чувствительного элемента в присутствии теплового источника. Физическая суть задачи состоит в получении профилей основных характеристик потоков при воздействии указанных факторов и в анализе взаимодействия с водой наночастиц меди (Cu), глинозема (Al_2O_3) и одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ). Определяющие дифференциальные уравнения с частными производными относительно импульса и энергии были преобразованы в обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) относительно гарантированных групп управляющих параметров. Численные и аналитические решения ОДУ найдены с применением метода Фельберга 4-го и 5-го порядков с математическим



пристреливанием и асимптотического метода оптимальных гомотопий. Анализ показал, что между численными и аналитическими решениями нет значимой разницы. Установлено, что в явлениях сжатия потока доминирующую роль играет объемная доля наночастиц. Система вода – ОУНТ показала наилучшие характеристики теплопереноса в режиме течения под действием магнитного поля и теплового излучения, по сравнению с другими системами.

Ключевые слова: объемная доля наночастиц; сжимаемый поток; поверхность датчика; ОУНТ; энергия теплового излучения

Ссылка при цитировании: Кандасами Р., Зайлани Н.А.Б.М., Фатиха Ф.Н.Б.Дж. Влияние объемных долей наночастиц в водных наножидкостях на характеристики сжимаемого МГД-потока этих жидкостей по пористой поверхности датчика // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 34–53. DOI: 10.18721/JPM.10403

Introduction

Nanofluids are conceivable thermal energy transfer fluids with uprated thermophysical properties and heat-transfer performance; they can be activated in many devices for better enforcement (i.e., energy, heat-transfer and other performances). In nanotechnology, a particle is defined as a small localized object of substance that reacts as a perfect unit with regard to its transport and resources. Particles are limited on the sizes. Nanoparticle research is currently an area of great scientific importance due to an extensive cast of possible operations in medical, optical and electrical fields. Squeezed flow within parallel walls has attracted the attention of more and more researchers in the field of mechanics. The interest in this phenomenon is due to its potential for use in engineering, fluid metal purification, foodstuff and chemical industries, compression and injection shaping, etc. In addition to an academic interest, squeezing nanofluid flow presents a range of applications at the industry level such as petroleum, biochemical technology, foodstuff engineering and medicine manufacturing [1 – 5]. The effect of the magnetic field normal to the flow of thermally conducting nanofluid on the boundary layer over a flat wall is extensively discussed in the literature [6 – 7]. Recently, the effects of magnetic strength on oscillatory squeezed discharges have been analyzed inside thin films by Khaled and Vafai [8] where they have established that magnetic strength can decrease a recurving ability inside thin films correlated with immense squeezing issues. In any case, the literature lacks reviews about the issues of magnetic range in flow and, correspondingly, on thermal

and diffusion transfer past a sensor wall located within fluidic cells, with account of squeezed flow conditions. The conventional heat transfer nanofluids, including oil, ethylene glycol and water have weak thermal energy conductivity compared to solids. To increase the thermal energy conductivity of these fluids, small particles (nanoparticles) of the solids possessing stronger thermal energy conductivity are integrated within the base fluid which provides a better heat transfer rate [9 – 19].

Nanofluid, i.e., an admixture of nanoparticles and water, is a new type of energy transport fluid. The fluids with remarkably enhanced thermal energy conductivity have been useful for several engineering and industrial purposes. Cooling rate necessities may not be achieved by the use of ordinary heat transfer fluids since these fluids show reduced thermal energy conductivity. Thermal conductivity and thermal performance of ordinary heat transfer fluids may be increased by immersing the nanoparticles. Novel properties of nanofluids make them potentially applicable as a distinct mechanism of thermal energy transfer in digital electronics, fuel cells, hybrid-powered engines, etc. It is hoped that MHD investigation of nanofluids is important in optical gratings, optical switches, ink float partition, cancer therapy by piloting active particles in the bloodstream to a tumor with magnets. Masuda et al. [20] studied the alterations in heat conductivities and viscosities of liquids through the dispersion of ultrafine particles in the base fluids. Choi [21] found that the presence of nanoparticles in the base fluid enhances the thermal properties of fluids.

The strengthening of heating in an industrial process may create a decrease in energy and growth time, increase in heat rating and

prolong the working life of equipment. Some processes are even affected qualitatively by the action of increased thermal energy transfer. The development of high-performance thermal systems for heat transfer enrichment has become attractive nowadays. A number of studies have been performed to gain an understanding of thermal energy transfer enforcement for experimental application to heat transfer enhancement. Thus, the advent of high heat flow development has generated sufficient appeal for new researches to enhance heat transfer. Single-walled carbon nanotubes (SWCNTs), a member of the carbon family, are one-dimensional equivalents of zero-dimensional decomposed molecules with rare constitutional and electronic properties. Single-walled nanotubes are the most likely candidate for miniaturizing electronics beyond the micro electro-thermal scale presently utilized in electronics. Carbon nanotubes (CNTs) have been the focus of much attention because of their linear model and notable mechanical, thermal, and electrical properties [22 – 26]. CNTs have been used as preservatives in liquids to enhance thermal energy conductivity, one of the most important issues in industry. Applications of nanofluids in industries such as heat exchanging devices appear promising with these properties. Anyway, the improvement and applications of nanofluids may be hindered by several factors such as enhanced pushing power and pressure drop, nanofluids' thermal performance in turbulent flow, lesser specific heat of nanofluids and higher production cost of nanofluids.

The object of the present work is to analyze the effects of nanoparticle volume fraction on copper, aluminum and CNTs suspended in water-based unsteady external squeezing MHD flow over a flat permeable sensor wall in the existence of thermal radiation energy.

The analysis is concerned with a certain group of squeezed flows such that the occurring flows may be solved using similarity transformations and afterwards the problem is analyzed by applying the fourth or fifth order Fehlberg technique with the shooting method and OHAM. Several aspects of the problem are investigated and presented graphically taking into account the physical parameters involved

within it and the results obtained are correlated with the applicable literature.

Mathematical analysis

In this study, an unsteady two-dimensional MHD squeezing nanofluid flow being between two infinite parallel plates is considered. Natural flow composition of this problem is given in such a way that the plate is enclosed inside a squeezed channel so that the height $h(t)$ is more than the boundary layer thickness and the squeezing in the free stream is expected to exit from the edge of the wall (Fig. 1). A microcantilever sensor is placed within the walls and the upper wall is compressed while lower plate being fixed. The working nanofluid is assumed to be Newtonian and electrically conducting with σ as its electrical conductance and the magnetic field with a time-dependent strength B_0 is stimulated perpendicular to the flow in the y -direction while the induced magnetic Reynolds number is negligible. The system of controlling equations is defined [27, 28, 32] as

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \\ = -\frac{1}{\rho_{nf}} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) + \nu_{nf} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \left(\frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf} K} + \frac{\sigma_{nf} B_0^2}{\rho_{nf}} \right) u, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} = -\frac{1}{\rho_{nf}} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) - \frac{\sigma_{nf} B_0^2}{\rho_{nf}} U, \quad (3)$$

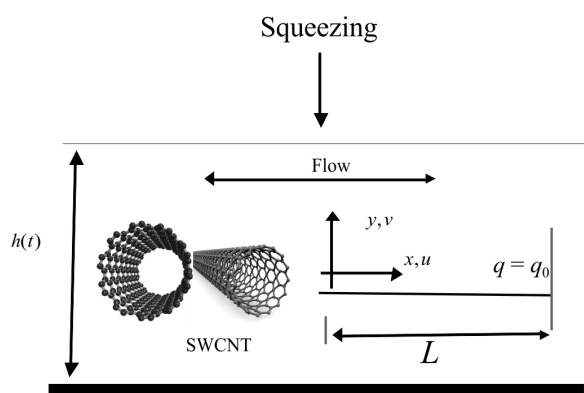


Fig. 1. Flow configuration and coordinate system

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \\ = \alpha_{nf} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{1}{(\rho c_p)_{nf}} \frac{\partial q_r}{\partial y} + \frac{Q_0(T - T_\infty)}{(\rho c_p)_{nf}}. \end{aligned} \quad (4)$$

with boundary conditions

$$\begin{aligned} u(x, 0, t) = 0, v(x, 0, t) = v_0(t), \\ -k_{nf} \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial t} = q(x), \\ u(x, \infty, t) = U(x, t), T(x, \infty, t) = T_\infty, \end{aligned} \quad (5)$$

where u, v are the velocity components in the x and y directions; T is the temperature of the nanofluid; t is the time; p is the fluid pressure; σ_s, σ_f are the electrical conductivity of the base fluid and the nanofluid; v_0 is a constant; U is the free-stream velocity; a is a constant; Q_0 is the heat generation or absorption coefficient.

Physically, $v_w < 0$ means injection, and $v_w > 0$ implies suction of fluid; the magnetic Reynolds number is considered so small that the magnetic boundary-layer thickness is extensive and the convenient magnetic field is gradual compared with the applied magnetic field. For particle-fluid mixtures, several theoretical studies have been carried out starting with Maxwell's classical works [29, 30]. The Maxwell structure for thermal energy conductivity for solid – liquid combining relatively large particles (micro-/mini- size) is good for fine solid species. Viscosity reflects a fluid's internal resistance to flow and, in the case of nanofluids, depends on the nature and a size of particles. The thermophysical properties established in the nanofluid are defined as

$$\begin{aligned} \alpha_{nf} &= \frac{k_{nf}}{(\rho c_p)_{nf}}, \quad \rho_{nf} = (1 - \zeta)\rho_f + \zeta\rho_s, \\ \mu_{nf} &= \frac{\mu_f}{(1 - \zeta)^{2.5}}, \\ (\rho c_p)_{nf} &= (1 - \zeta)(\rho c_p)_f + \zeta(\rho c_p)_s, \\ \sigma_{nf} &= (1 - \zeta)\sigma_f + \zeta\sigma_s, \\ \frac{k_{nf}}{k_f} &= \left\{ \frac{(k_s + 2k_f) - 2\zeta(k_f - k_s)}{(k_s + 2k_f) + 2\zeta(k_f - k_s)} \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

where ζ is the nanoparticle volume fraction; μ_f is the dynamic viscosity of the basic fluid; β_f, β_s

are the volumetric extension coefficients of the water and nanoparticle, respectively; ρ_f, ρ_s are the densities of the basic fluid and nanoparticle; σ_f, σ_s are the electric conductivities of the basic fluid and nanoparticle; k_f is the thermal conductivity of the fluid; k_s is the thermal energy dynamism of the solid fraction.

Let us employ Rosseland's approximation [31]:

$$q_{rad}'' = q_r = -\frac{4\sigma_1}{3k^*} \frac{\partial T^4}{\partial y},$$

where σ_1 is the Boltzmann constant, k^* is the penetration coefficient.

Expanding Taylor's series with T^4 being

$$T^4 \cong 4T_\infty^3 T - 3T_\infty^4,$$

we obtain

$$\frac{\partial q_r}{\partial y} = -\frac{16\sigma_1 T_\infty^3}{3k^*} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}.$$

Based on the free-stream condition, Eqs. (2), (3) become

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \\ - \left(\frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf} K_0} + \frac{\sigma_{nf} B_0^2}{\rho_{nf}} \right) (u - U), \end{aligned} \quad (7)$$

where

$$U \frac{dU}{dx} = -\frac{1}{\rho_{nf}} \frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf} K_0} + \frac{\sigma_{nf} B_0^2}{\rho_{nf}} \right) U;$$

K_0 is the nonuniform permeability of the medium; B_0 is the externally imposed magnetic strength in the y -direction.

The stream function can be obtained from Eq. (1) as

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (8)$$

Based on Eq. (8) with the similarity variables, we have

$$\eta = y \sqrt{\frac{a}{v_f}}, \quad \psi = \sqrt{av_f} x f(\eta), \quad a = \frac{1}{s + bt}, \quad (9)$$

$$\theta(\eta) = \frac{T - T_\infty}{\frac{q_0 x}{k_f} \sqrt{\frac{v_f}{a}}}, \quad q(x) = q_0 x, \quad v_0(t) = v_i(t),$$

where b , s are random constants; a is the strength of squeezing flow; q_0 is the heat flux; v_0 is the velocity on the sensor surface when permeable walls are designed.

Taking into account the conditions given by Eq. (9), the dynamics of the channel's height governs by the following conditions:

$$h(t) = h_0 / (s + bt)^{-\frac{1}{b}} \text{ for } b > 0;$$

$$h(t) = h_0 e^{-st} \text{ for } b = 0.$$

The surface permeable velocity is established to increase as the time decelerates ($b > 0$) because compressing velocities enhance as time decelerates.

Eqs. (4) and (7) become

$$f''' + A_1 \left(\left(f + \frac{b\eta}{2} \right) f'' - f'^2 + b(f'^2 - 1) + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f') + 1 \right) = 0. \quad (10)$$

$$\frac{1}{Pr} \left(\frac{k_{nf}}{k_f A_3} + \frac{Pr R}{k_f A_3} \right) \theta'' + \left(\frac{\delta}{A_3} \theta + \left(f + \frac{b\eta}{2} \right) \theta' - \left(f' + \frac{b}{2} \right) \theta \right) = 0. \quad (11)$$

with boundary conditions

$$f(0) = S, f'(0) = 0, \theta'(0) = -\frac{k_f}{k_{nf}}; \quad (12)$$

$$f'(\infty) \rightarrow 1, \theta(\infty) \rightarrow 0,$$

$$A_1 = (1 - \zeta)^{2.5} \left(1 - \zeta + \zeta \frac{\rho_s}{\rho_f} \right),$$

$$A_2 = (1 - \zeta)^{2.5} \left(1 - \zeta + \zeta \frac{\sigma_s}{\sigma_f} \right), \quad (13)$$

$$A_3 = \left(1 - \zeta + \zeta \frac{(\rho c_p)_s}{(\rho c_p)_f} \right),$$

where $Pr = (c_p \mu)_f / k_f$ is the Prandtl number;

$$\delta = \frac{Q_0 x}{(\rho c_p)_f U}$$

is the heat source/sink parameter;

$$\lambda = \frac{v_f x}{UK}$$

is the porous parameter;

$$M = \frac{\sigma_f B_0^2 x}{U \rho_f}$$

is the magnetic parameter;

$$R = \frac{16 \sigma_1 \theta_w^3}{3 k_f k^*}$$

is the thermal energy radiation parameter.

The physical quantities are as follows:

$$C_f = \frac{\tau_w}{\rho_f U^2}$$

is the skin friction coefficient;

$$Nu_x = \frac{q_w x}{k_f (T_w - T_\infty)}$$

is the local Nusselt number (τ_w and q_w are defined as

$$C_f (Re_x)^{1/2} = \frac{f''(0)}{(1 - \zeta)^{2.5}}, \frac{Nu_x}{Re_x^{1/2}} = -\frac{k_{nf}}{k_f} \theta'(0); \quad (14)$$

$Re_x = \frac{Ux}{v_f}$ is the local Reynolds number.

Results and discussion

Computations were worked out using the OHAM (Optimal Homotopy Asymptotic Method) and the fourth or fifth order Fehlberg technique with the shooting approach (numerical mechanism) for various values of the parameters. Eqs. (10) and (11) subjected to boundary conditions (12) were determined numerically and experimentally utilizing the Maple 18 and Mathematica 5.2 computer software. We have completely simulated the described processes.

Thermophysical properties of the fluid and the nanoparticles are given in Table 1.

The Prandtl number $Pr = 6.2$ corresponds to nanofluids unless otherwise specified. In order to validate our methods, it is predicted from Fig. 2 that the consistency with the theoretical solution of the temperature profiles and $f''(0)$ for various character of ζ are correlated with the results presented in Fig. 4, b and Table 2 (water-based Cu and Al_2O_3 when $\zeta = 0.0$) of Ref. [32]. Excellent agreement can be observed between them.

Table 1

Thermophysical properties of the fluid and the nanoparticles

Substance	ρ , kg/m ³	c_p , J/(kg·K)	k , W/(m·K)
Pure water	997.1	4179	0.613
Copper (Cu)	8933	385	401
Aluminum (Al ₂ O ₃)	3970	765	40
SWCNTs	2600	425	6600

Notations: ρ is the density, c_p is the specific heat at the constant pressure, k is the thermal conductivity coefficient; SWCNTs are Single-Walled Carbon NanoTubes.

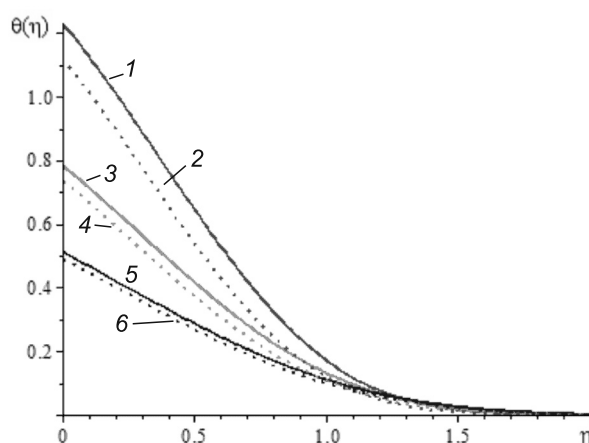


Fig. 2. Temperature profiles for (Cu – water) nanofluid flow for various nanoparticle volume fractions ζ and two M values; $\zeta = 0.0$ (curves 1, 2), 0.1 (3, 4), 0.2 (5, 6); $M = 0.0$ (1, 3, 5) and 1.0 (2, 4, 6). Comparison to Fig. 4, b of Ref. [32]

Table 2

Comparison of impacts of nanoparticle volume fraction ζ on $f''(0)$

Nanofluid	ζ value	$f''(0)$		Error between two methods
		Numerical method	OHAM	
Cu – water	0.0	1.48113419 [32]	1.48113419 [32]	0.00000000
	0.1	1.71105504	1.71105531	2.7E – 07
	0.2	1.75138728	1.75138766	3.8E – 07
Al ₂ O ₃ – water	0.0	1.48113419 [32]	1.48113419 [32]	0.00000000
	0.1	1.43438455	1.43438501	4.6E – 07
	0.2	1.33096758	1.33096794	3.6E – 07
SWCNTs – water	0.0	1.48113419 [32]	1.48113419 [32]	0.00000000
	0.1	1.45088235	1.45088232	3.0E – 08
	0.2	1.35571879	1.35571877	2.0E – 08

OHAM is the Optimal Homotopy Asymptotic Method

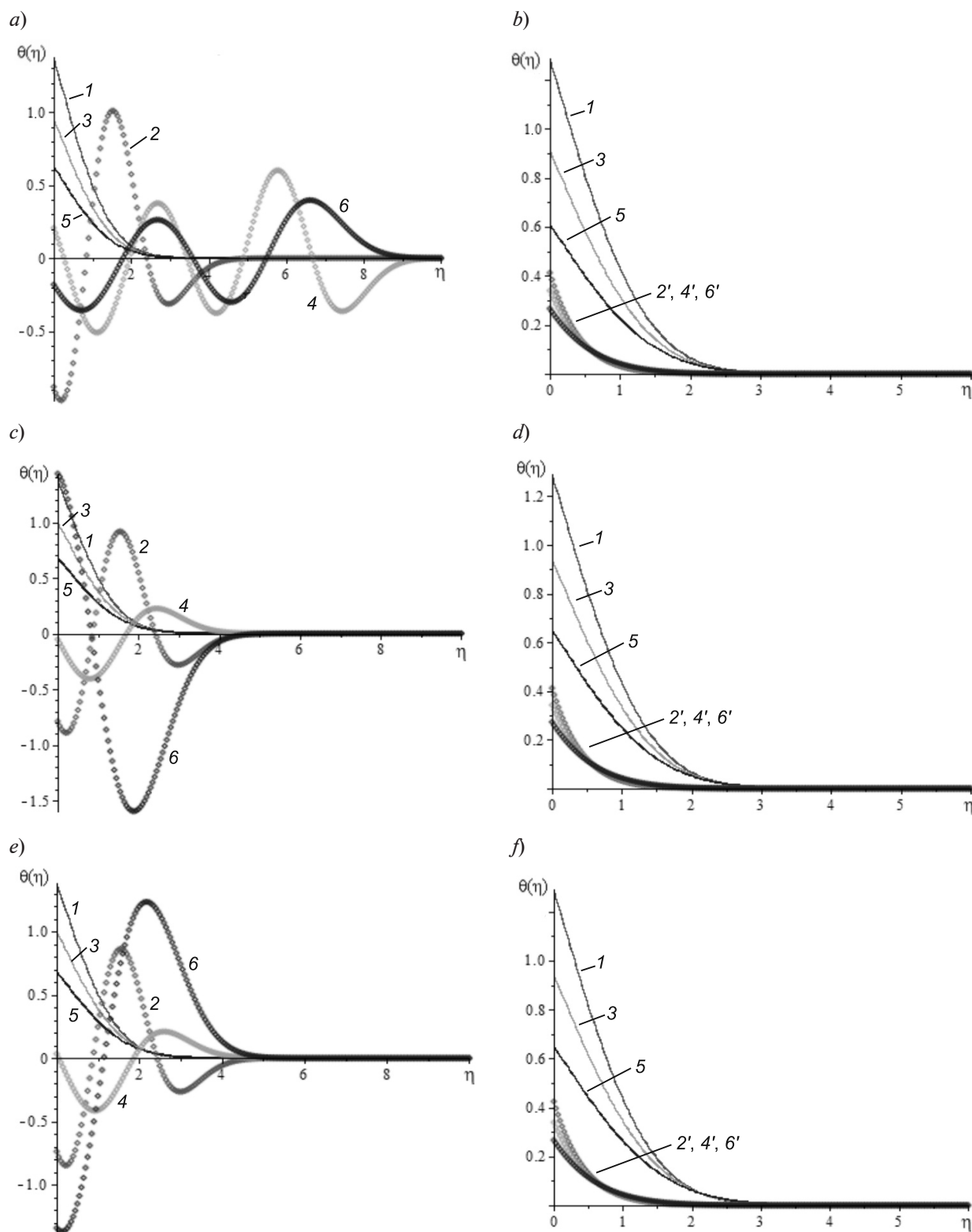


Fig. 3. Temperature profiles for flows of 3 nanofluid's compositions with various nanoparticle volume fractions ζ and three δ values, in the presence of heat source (a, c, e) and heat sink (b, d, f); there are (Cu – water) (a, b), (Al_2O_3 – water) (c, d) and (SWCNTs – water) (e, f) nanofluids; $\zeta = 0.01$ (curves 1, 2, 2'), 0.1 (3, 4, 4'), 0.2 (5, 6, 6'); $\delta = 0.0$ (1, 3, 5), 1.0 (2, 4, 6), -1.0 (2', 4', 6')

Table 3

Values of $\theta'(0)$ for various values of ζ and δ obtained for different nanofluids

δ	ζ	$\theta'(0)$		
		Cu–water	Al_2O_3 –water	SWCNTs–water
–1.0	0.01	0.4120137	0.4124028	0.4242504
	0.10	0.3393746	0.3429119	0.3391175
	0.20	0.2662112	0.2729732	0.2665138
0.0	0.01	1.3756611	1.3756611	1.3844948
	0.10	0.9537223	0.9981022	1.0019741
	0.20	0.6317888	0.6845075	0.6872416
1.0	0.01	–0.8804759	–0.7885852	–0.73798356
	0.10	0.2069197	–0.0527793	0.0342681
	0.20	–0.1802860	1.4355837	–1.3426626

Fixed parameter values: $\text{Pr} = 6.2$, $S = 0.5$, $b = 0.5$, $M = 1.0$, $R = 1.0$.

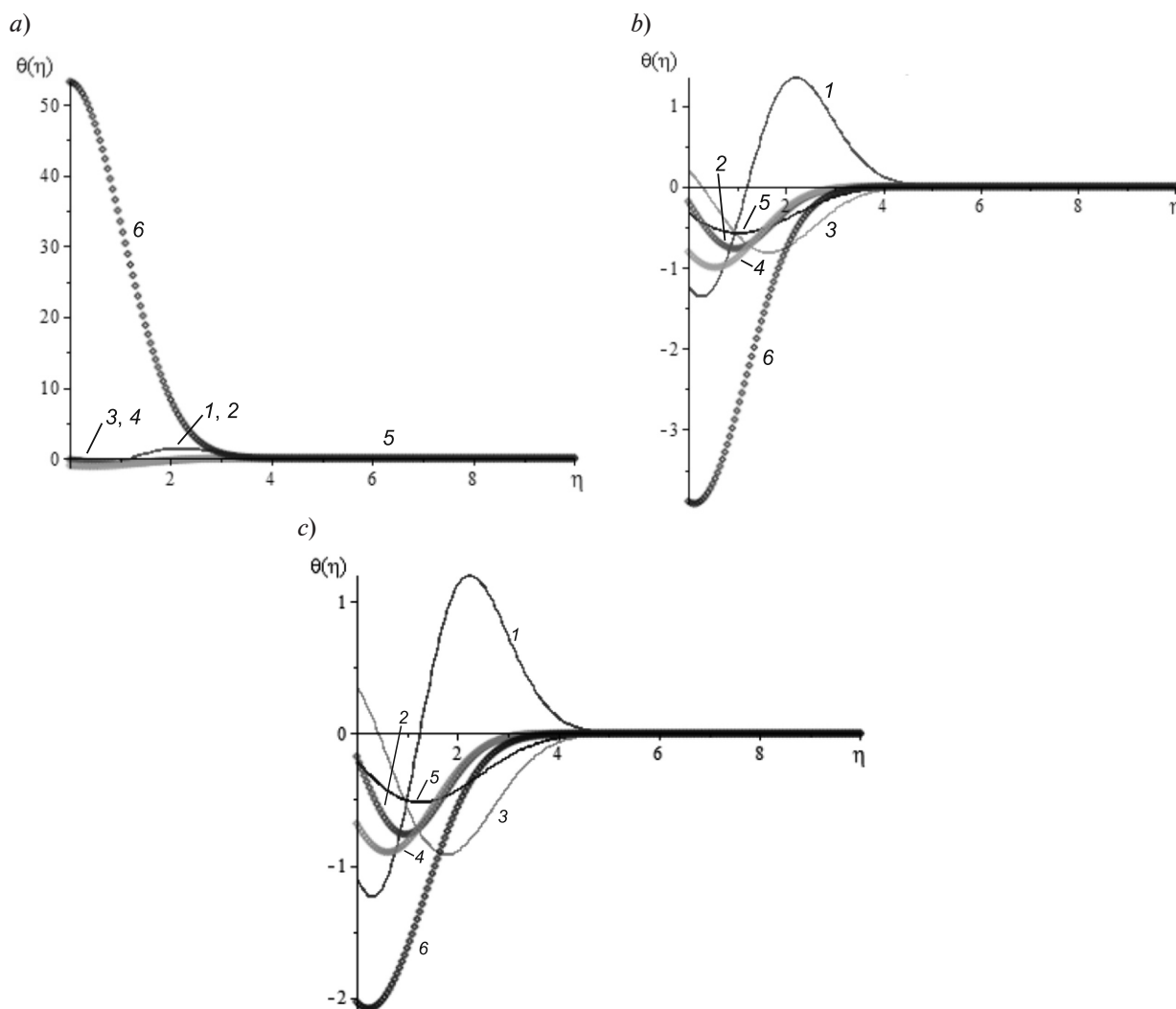


Fig. 4. Temperature profiles for flows of 3 nanofluid's compositions with various nanoparticle volume fractions ζ and two b values, in the presence of squeezed flow; there are (Cu – water) (a), (Al_2O_3 – water) (b) and (SWCNTs – water) (c) nanofluids; $\zeta = 0.01$ (curves 1, 2), 0.1 (3, 4), 0.2 (5, 6); $b = 0.0$ (1, 3, 5) and 1.0 (2, 4, 6)

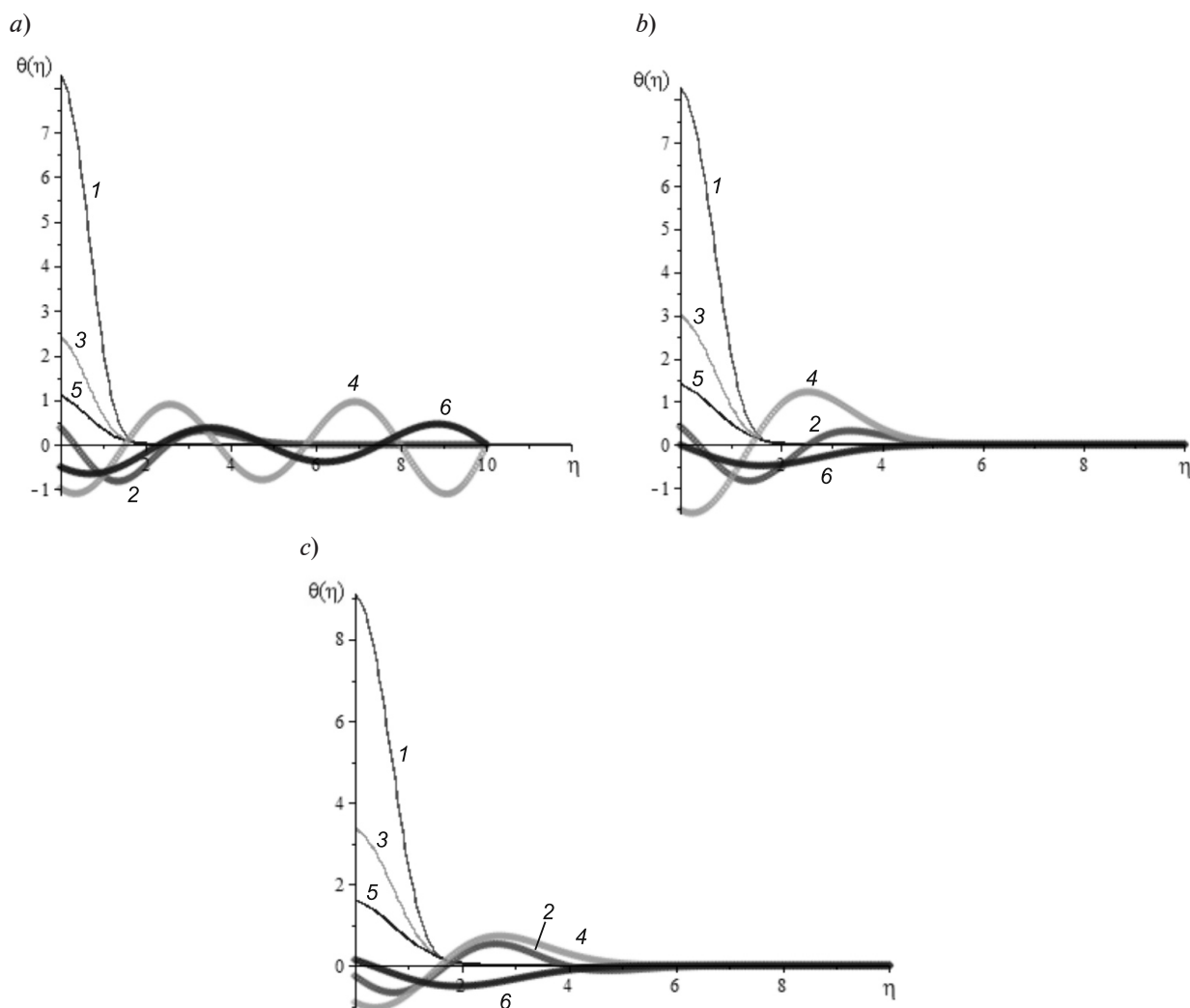


Fig. 5. Temperature profiles for flows of 3 nanofluid's compositions with various nanoparticle volume fractions ζ and two R values, in the presence of thermal radiation; there are (Cu – water) (a), (Al_2O_3 – water) (b) and (SWCNTs – water) (c) nanofluids; $\zeta = 0.01$ (curves 1, 2), 0.1 (3, 4), 0.2 (5, 6); $R = 0.0$ (1, 3, 5) and 1.0 (2, 4, 6)

Table 4

Values of $\theta'(0)$ for various values of ζ and R obtained for different nanofluids

R	ζ	$\theta'(0)$		
		Cu–water	Al_2O_3 –water	SWCNTs–water
–1.0	0.01	8.2923900	8.2923900	9.1264301
	0.10	2.4082687	3.0094599	3.3680544
	0.20	1.1025964	1.4040971	1.6065768
1.0	0.01	0.3819982	0.4199881	–0.2552729
	0.10	–0.9759417	–1.5083132	0.1398253
	0.20	–0.4970868	–0.0074834	0.1398253

Fixed parameter values: $\text{Pr} = 6.2$, $S = 0.5$, $b = 0.5$, $M = 1.0$, $\delta = 1.0$.

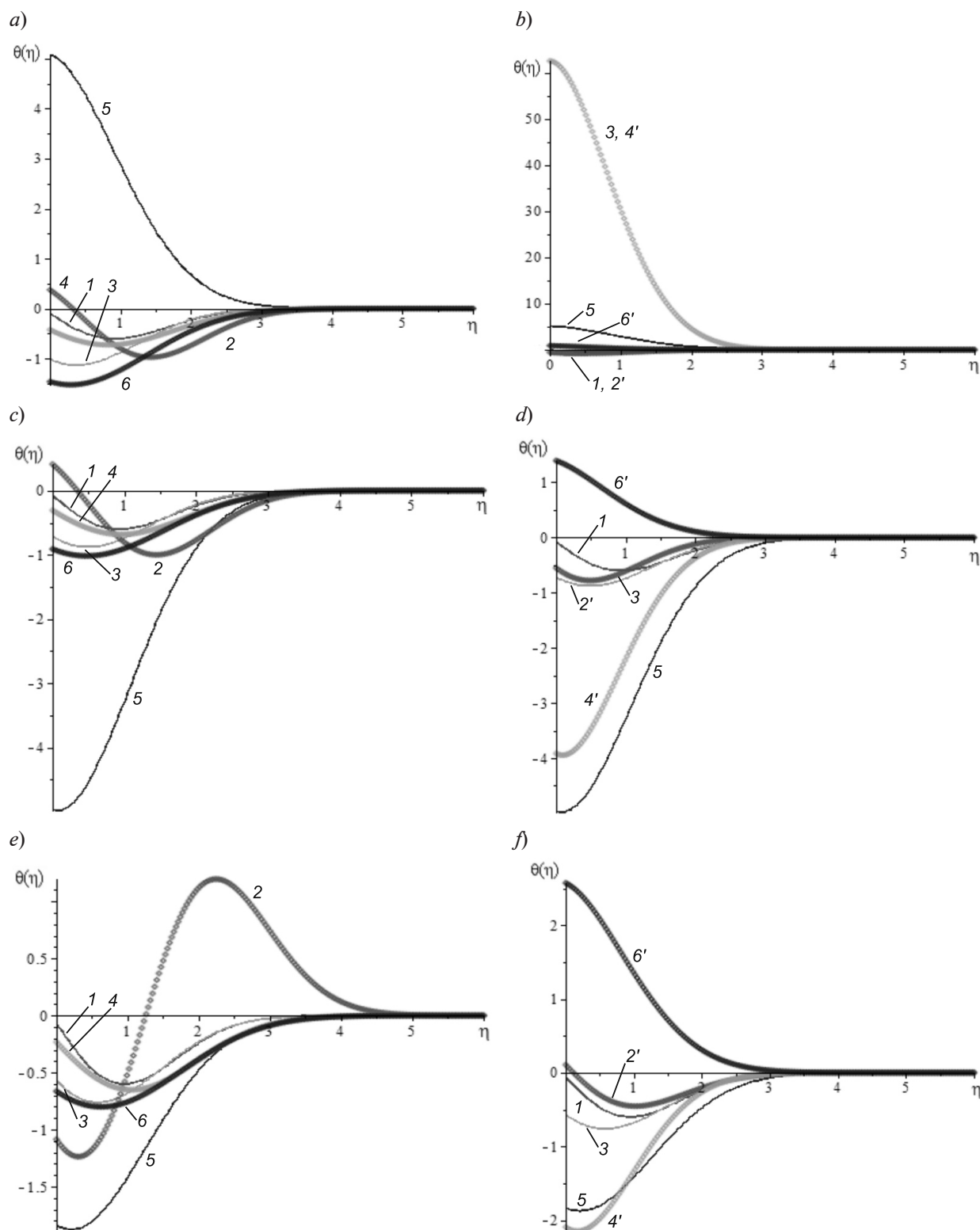


Fig. 6. Temperature profiles for flows of 3 nanofluid's compositions with various nanoparticle volume fractions ζ and three S values, in the presence of suction (a, c, e) and injection (b, d, f); there are (Cu – water) (a, b), (Al_2O_3 – water) (c, d) and (SWCNTs – water) (e, f) nanofluids; $\zeta = 0.01$ (curves 1, 2, 2'), 0.1 (3, 4, 4'), 0.2 (5, 6, 6'); $S = 0.0$ (1, 3, 5), 0.5 (2, 4, 6), -0.5 (2', 4', 6')

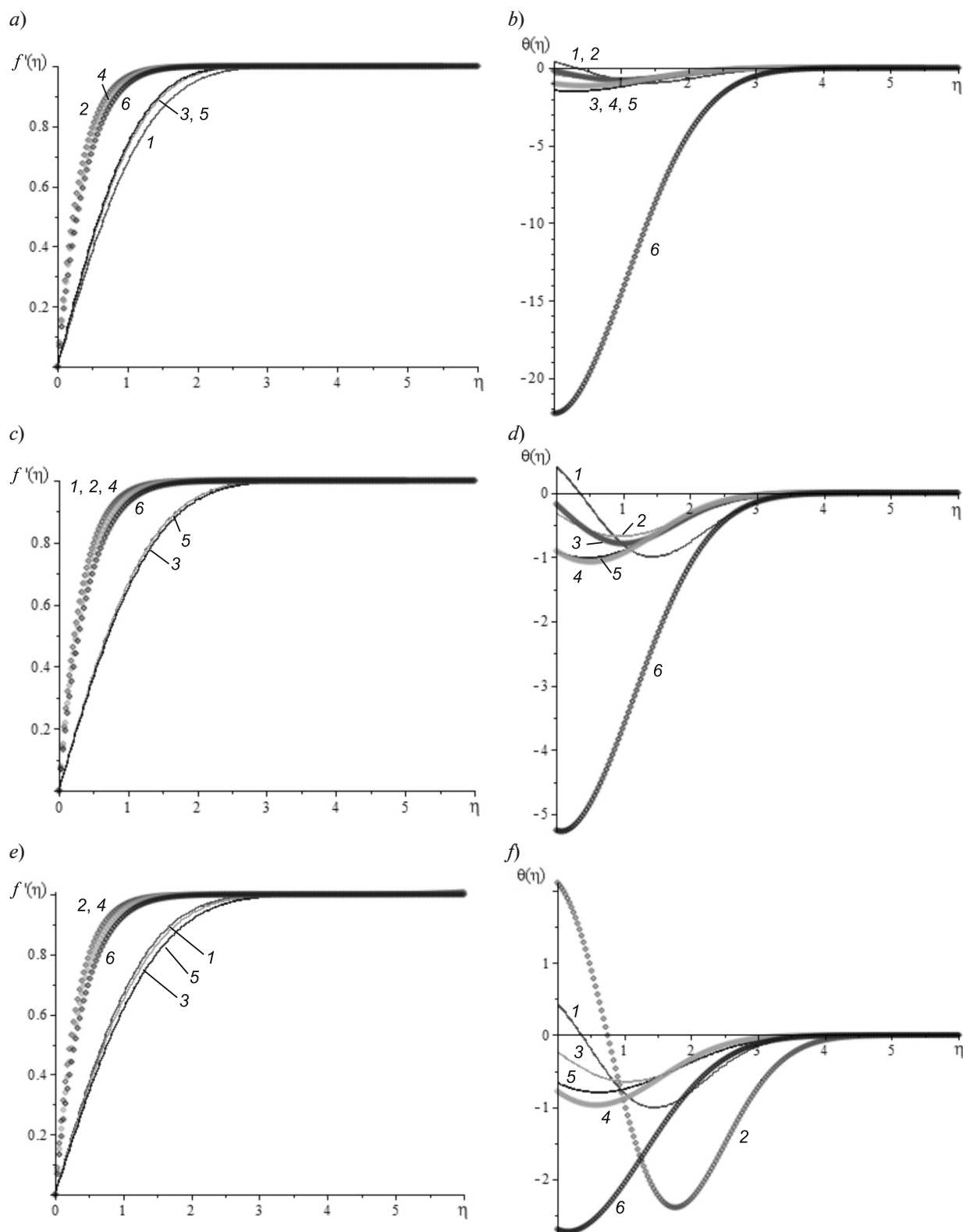


Fig. 7. Velocity (*a, c, e*) and temperature (*b, d, f*) profiles for flows of 3 nanofluid's compositions with various nanoparticle volume fractions ζ and two M values, in the presence of suction/injection; there are (Cu – water) (*a, b*), (Al_2O_3 – water) (*c, d*) and (SWCNTs – water) (*e, f*) nanofluids; $\zeta = 0.01$ (curves 1, 2), 0.1 (3, 4), 0.2 (5, 6); $M = 0.0$ (1, 3, 5), 1.0 (2, 4, 6)

Table 5

Values of $\theta'(0)$ for various values of ζ and S obtained for different nanofluids

S	ζ	$\theta'(0)$		
		Cu–water	Al ₂ O ₃ –water	SWCNTs–water
–0.5	0.01	–0.58606137	–0.55027344	0.1074283
	0.10	62.513571	–3.91577109	–2.09399467
	0.20	0.9053331	1.3937257	2.57353878
0.0	0.01	–0.09213680	–0.07197389	–0.06139028
	0.10	–1.01293273	–0.71568275	–0.56854083
	0.20	5.0843311	–4.96344745	–1.83299565
0.5	0.01	0.37498867	0.41074759	–1.08463332
	0.10	–0.42425009	–0.30778978	–0.23271640
	0.20	–1.46183727	–0.91021030	–0.66350571

Fixed parameter values: $Pr = 6.2$, $R = 0.5$, $b = 0.5$, $M = 1.0$, $\delta = 1.0$.

Table 6

Values of $\theta'(0)$ for various values of ζ and M obtained for different nanofluids

M	ζ	$\theta'(0)$		
		Cu–water	Al ₂ O ₃ –water	SWCNTs–water
0.0	0.01	0.3749886	0.4107476	0.4298806
	0.10	–0.4242501	–0.3077898	–0.23271640
	0.20	–1.4618373	–0.9102103	–0.6635057
1.0	0.01	–0.1818800	–0.9028197	2.1186300
	0.10	–1.0052609	–0.7156827	–0.7817068
	0.20	–22.2641819	–5.2507555	–2.6988377

Fixed parameter values: $Pr = 6.2$, $R = 0.5$, $b = 0.5$, $S = 0.5$, $\delta = 1.0$.

Effect of ζ on temperature circulation of water-based Cu, Al₂O₃ and SWCNTs in the presence of heat source/sink is shown in Fig. 3. Heat source generates energy which causes the temperature of water-based Cu, Al₂O₃ and SWCNTs to first increase and then decrease in the boundary layer with increasing nanoparticle volume fraction, whereas the increasing nanoparticle volume fraction in the presence of the heat source parameter δ has the tendency to increase and decrease the thermal state in the boundary layer. The heat transfer rate of water-based Cu and SWCNTs first decreases and then increases with increasing nanoparticle volume fraction in the presence of heat source (see Table 3). It is interesting to note that the nanoparticle volume fraction of

the water-based Cu plays a dominant role on the temperature field (in the presence of the heat source) compared with the other mixtures in squeezed flow regime. It can be seen from Fig. 4 that the temperature of water-based Al₂O₃ and SWCNTs decreases with increasing nanoparticle volume fraction in the presence of squeezed flow. The temperature of water-based Cu, Al₂O₃ and SWCNTs first decreases and then vibrates up and down with increasing nanoparticle volume fraction in the presence of thermal radiation (see Fig. 5). In the presence of thermal radiation, the heat transfer rate first increases and then decreases with increasing nanoparticle volume fraction (see Table 4). In the presence of suction, the temperature of water-based SWCNTs first increases and then

decreases with increasing nanoparticle volume fraction, whereas the opposite trend is observed for injection with increasing nanoparticle volume fraction (see Fig. 6). The nanoparticle volume fraction in the presence of suction has a significant effect on temperature field. In the presence of suction, it is also observed that the heat transfer rate of water-based SWCNTs first decreases and then increases with increasing nanoparticle volume fraction (see Table 5). For all three cases, it has been found that $f'(\eta)$ and $\theta(\eta)$ of the nanofluids decrease with increasing the nanoparticle volume fraction in the presence of a magnetic field. This is due to the combined effects of the Lorentz force with a size and a shape of the nanoparticle volume fraction (see Fig. 7 and Table 6), whereas the heat transfer rate increases with increasing the nanoparticle volume fraction when $M = 1.0$. In the presence of thermal radiation, heat generation and a magnetic field on the squeezed flow, it is observed that the temperature profiles for water-based SWCNTs are higher than those of other nanofluids, which implies that the SWCNTs show a unique combination of stiffness, energy, and inflexibility compared with other base materials which usually need one or more of these characteristics. Thermal and electrical conductivity of SWCNTs are also very high, and comparable to other conductive materials. An increase in the thermal boundary layer field due to an increase in the thermal conductivity shows that the temperature field increases gradually as we replace water-based copper by aluminum and SWCNTs in the sequence described in Figs. 3 – 7.

Conclusion

The performance of nanoparticle volume fraction of water-based Cu, Al_2O_3 and SWCNTs is examined between squeezing surfaces in such a form that the top plate is compressed. Association of temperature and the heat transfer rate among the nanofluids with different parameters are illustrated by figures and tables. The following conclusions can be drawn regarding the results obtained:

(i) In the presence of heat source/sink, the (Cu – water) nanofluid plays a dominant role in affecting the thermal boundary layer thickness with increasing the nanoparticle

volume fraction compared with other mixtures in the squeezed flow region.

(ii) In the presence of squeezed parameter ($b = 1.0$) and at the nanoparticle volume fraction $\zeta = 0.2$, the temperature distribution of the (Cu – water) nanofluid attains its maximum, whereas the (Al_2O_3 – water) one attains its minimum value in the squeezed flow regime over a sensor surface.

(iii) In the presence of thermal radiation energy ($R = 1.0$), the temperature profiles of the (Cu – water) nanofluid increase and decrease with increasing the nanoparticle volume fraction as compared to the other mixtures in the squeezed flow regime.

(iv) In the presence of suction at the wall, the temperature distribution at the nanoparticle volume fraction $\zeta = 0.01$, in the presence of the (SWCNTs – water) nanofluid, attains its highest value compared with other mixtures in the squeezed flow regime over a sensor surface.

(v) In the presence of a magnetic field ($M = 10.0$), the (SWCNTs – water) nanofluid plays a dominant role with increasing the nanoparticle volume fraction due to its high thermal conductivity.

The thermal boundary layer thickness of the water-based SWCNTs are found to be much higher than those of other considered nanoparticles with the same volume fraction.

Being based on obtained results, we evaluated the efficiency of nanofluids as coolants in the laminar squeezed flow regimes. It was established that the water-based SWCNTs investigated in this paper can be beneficial in energy systems, rheology, material processing, lubrication and biomedical applications.

Appendix 1

List of symbols and units

B_0 , $\text{kg}\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{A}^{-1}$, is the magnetic flux density;
 c_p , $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, is the specific heat at constant pressure;
 k^* , m^{-1} , is the mass absorption coefficient;
 K , m^2 , is the permeability of the porous medium;
 k_f , $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, is the thermal conductivity of the base fluid;
 k_s , $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, is the thermal conductivity of the nanoparticle;

k_{nf} , $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, is the effective thermal conductivity of the nanofluid;

Pr is the Prandtl number;

M is the magnetic parameter;

q_{rad}'' , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-3}\cdot\text{K}^{-1}$, is the incident radiation flux of intensity;

Q_0 , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$, is the rate of source/sink;

t , s, is the time;

T , K, is the temperature of the fluid;

T_w , K, is the temperature of the wall;

T_∞ , K, is the temperature of the fluid far away from the wall;

R is the thermal radiation parameter;

u , v , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, are the velocity components in x , y set;

$U(x)$, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, is the velocity of the fluid away from the wedge;

V_0 , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, is the velocity of suction / injection;

α_{nf} , $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, is the nanofluid thermal diffusivity;

ρ_f , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, is the base fluid density;

ρ_s , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, is the nanoparticle density;

ρ_{nf} , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, is the nanofluid density;

$(\rho c_p)_{nf}$, $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{K}^{-1}$, is the heat capacitance of the nanofluid;

σ_{nf} , $\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$, is the electric conductivity of the nanofluid;

σ_1 , $\text{kg}\cdot\text{s}^{-3}\cdot\text{K}^{-4}$ is the Stefan – Boltzman constant;

ν_f , $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, is the base fluid dynamic viscosity;

ν_{nf} , $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, is the nanofluid dynamic viscosity;

δ is the heat source / sink parameter;

λ is the porous parameter;

ζ is the nanoparticle volume fraction.

Appendix 2

I. Numerical solving

Eqs. (10), (11) subjected to boundary condition (12) are converted into the following simultaneous system of first order differential equations, as follows:

$$\begin{aligned} A_1 &= (1 - \zeta)^{2.5} \left(1 - \zeta + \zeta \frac{\rho_s}{\rho_f} \right), \\ A_2 &= (1 - \zeta)^{2.5} \left(1 - \zeta + \zeta \frac{\sigma_s}{\sigma_f} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

$$A_3 = 1 - \zeta + \zeta \frac{(\rho c_p)_s}{(\rho c_p)_f}, A_4 = 1 - \zeta, \quad (15)$$

$$A_5 = \frac{k_{nf}}{k_f A_3} + \frac{\text{Pr } R}{k_f A_3};$$

$$f'(\eta) = u(\eta), u'f(\eta) = v(\eta),$$

$$\begin{aligned} v'(\eta) &= -A_1 \left(\left(f + \frac{b\eta}{2} \right) f'' - f'^2 + b(f'^2 - 1) + \right. \\ &\quad \left. + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f') + 1 \right); \end{aligned} \quad (16)$$

$$\theta'(\eta) = p(\eta),$$

$$\begin{aligned} p'(\eta) &= -\frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta + \left(f + \frac{b\eta}{2} \right) \theta' - \right. \\ &\quad \left. - \left(f' + \frac{b}{2} \right) \theta \right). \end{aligned} \quad (17)$$

The boundary conditions are

$$f(0) = S, u(0) = 0, p(0) = -\frac{k_f}{k_{nf}}; \quad (18)$$

$$u(L) = 1, \theta(L) = 0, v(0) = \alpha, \theta(0) = \beta,$$

where α , β are a priori unknowns to be determined as a part of the solution.

This software uses a fourth-fifth order Runge – Kutta – Fehlberg method with the shooting technique as a default to solve the boundary value problems numerically using the MAPLE 18 Dsolve command. The values of α and β are determined upon solving the boundary conditions

$$v(0) = \alpha, \theta(0) = \beta$$

on a trial and error basis.

The numerical results are represented in the form of the dimensionless velocity and temperature in the presence of water, ethylene glycol and engine oil-based SWCNTs, Cu and Al_2O_3 .

II. Analytical solving using the optimal homotopy asymptotic method (OHAM)

On the OHAM grounds, the nonlinear ordinary differential equations (8) – (10) with boundary conditions (12) can be written as

$$f = f_0 + pf_1 + p^2 f_2, \quad \theta = \theta_0 + p\theta_1 + p^2 \theta_2;$$

$$H_1(p) = pC_1 + p^2 C_2, \quad H_2(p) = pC_3 + p^2 C_4,$$

where $p \in [0, 1]$ is the embedding parameter, H_p is the nonzero auxiliary function, C_i are constants [27].

III. Approximation of the momentum boundary layer problem

On the OHAM grounds, Eq. (10) and boundary conditions (12) can be written as

$$\begin{aligned} L &= f'' + f', \\ N &= f''' + A_1 \left[\left(f + \frac{b\eta}{2} \right) f'' - f'^2 + b(f'^2 - 1) + \right. \\ &\quad \left. + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f') + 1 \right] - f'' - f', \end{aligned} \quad (19)$$

where L and N are the linear and the nonlinear operators, respectively.

After applying OHAM to Eq. (8) with respect to Eq. (12), we have

$$\begin{aligned} (1-p)[f'' + f'] &= \\ &= H_p \left[f''' + \left(A_1 \left(f + \frac{b\eta}{2} \right) f'' - f'^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + b(f'^2 - 1) + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f') + 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (20)$$

and the zero-order equation p^0 of the boundary condition is

$$f_0'' + f_0' = 0, \quad f_0(0) = S, \quad f_0'(0) = 0. \quad (21)$$

The solution of the zero-order equation is

$$\begin{aligned} f_0(\zeta) &= -[e^{-\zeta}(1 - e^\zeta + n - ne^\zeta - \\ &\quad - \alpha e^\zeta + \alpha ne^\zeta)] / (1 + n). \end{aligned} \quad (22)$$

The first-order equation p^1 is

$$\begin{aligned} f_1'' + f_1' &= f_0'' + f_0' + \\ &+ C_1 \left[f_0''' + A_1 \left(\left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) f_0'' - f_0'^2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + b(f_0'^2 - 1) + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f_0') + 1 \right]; \\ f_1(0) &= 0, \quad f_1'(0) = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

The second-order equation p^2 is

$$\begin{aligned} f_2'' + f_2' &= f_1'' + f_1' + \\ &+ C_1 \left[f_1''' + A_1 \left(\left(f_1 + \frac{b\eta}{2} \right) f_1'' - 2f_0'f_1' \right) + \right. \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} &\quad \left. + 2bf_0'f_1' - 2f_0'f_1' \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) \right] + \\ &+ C_2 \left[f_0''' + A_1 \left(\left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) f_0'' - f_0'^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + b(f_0'^2 - 1) + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f_0') + 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (24)$$

$$f_2(0) = 0, \quad f_2'(0) = 0.$$

Solving Eqs. (23) and (24) with the boundary conditions using Eq. (22), the solution of Eq. (10) can be determined approximately in the following form:

$$f(\xi) = f_0(\xi) + f_1(\xi) + f_2(\xi). \quad (25)$$

Therefore, the residual equation takes the form

$$\begin{aligned} R_1(\xi, C_1, C_2) &= \left[f'''(\xi) + A_1 \left(\left(f(\xi) + \frac{b\xi}{2} \right) f''(\xi) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - f'^2(\xi) + b(f'^2(\xi) - 1) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(M \frac{A_2}{A_1} + \frac{\lambda}{A_1} \right) (1 - f'(\xi)) + 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

The constants C_1 and C_2 can be optimally identified from the conditions

$$\frac{\partial J_1}{\partial C_1} = \frac{\partial J_1}{\partial C_2} = 0 \quad (27)$$

$$\text{where } J_1(C_i) = \int_0^\infty R_1^2(\xi, C_i) d\xi.$$

IV. Approximation of the energy boundary layer problem

On the OHAM grounds, Eq. (9) with the boundary condition (11) can be applied as

$$\begin{aligned} L &= (\theta' + \theta), \\ N &= \theta'' + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta + \left(f + \frac{b\eta}{2} \right) \theta' - \right. \\ &\quad \left. - \left(f' + \frac{b}{2} \right) \theta \right) - (\theta' + \theta), \end{aligned}$$

as before, L , N are the linear and the nonlinear operators.

Again, applying OHAM to Eq. (9) with respect to Eq. (11), we have

$$(1-p)[\theta' + \theta] = H_p \left[\theta'' + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta + \left(f + \frac{b\eta}{2} \right) \theta' - \left(f' + \frac{b}{2} \right) \theta \right) \right]. \quad (28)$$

The zero-order equation p^0 is

$$(\theta_0' + \theta_0) = 0, \quad \theta_0(0) = 1. \quad (29)$$

Therefore the solution of Eq. (29) is

$$\theta_0(\xi) = e^{-\xi}. \quad (30)$$

The first-order equation p^1 is

$$\begin{aligned} \theta_1' + \theta_1 &= \\ &= \theta_0' + \theta_0 + C_3 \left[\theta_0'' + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta_0 + \left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) \theta_0' - \left(f_0' + \frac{b}{2} \right) \theta_0 \right) \right], \theta_1(0) = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

The second-order equation p^2 is

$$\begin{aligned} \theta_2' + \theta_2 &= \theta_1' + \theta_1 + C_3 \left[\theta_1'' + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta_1 + \left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) \theta_1' + \left(f_1 + \frac{b}{2} \right) \theta_0' - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left(f_0' + \frac{b}{2} \right) \theta_1 - (f_1') \theta_0 + C_4 \left[\theta_0'' + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta_0 + \right. \right. \right. \end{aligned} \quad (32)$$

$$\left. \left. + \left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) \theta_0' - \left(f_0' + \frac{b}{2} \right) \theta_0 \right) \right], \theta_2(0) = 0. \quad (32)$$

Solving Eqs. (31) and (32) with the boundary conditions with the help of Eq. (30), the solution of Eq. (11) can be determined approximately as

$$\theta(\xi) = \theta_0(\xi) + \theta_1(\xi) + \theta_2(\xi). \quad (33)$$

The residual equation takes the form

$$\begin{aligned} R_2(\xi, C_3, C_4) &= \left[\theta''(\xi) + \frac{\text{Pr}}{A_5} \left(\frac{\delta}{A_3} \theta(\xi) + \left(f(\xi) + \frac{b\xi}{2} \right) \theta'(\xi) - \left(f'(\xi) + \frac{b}{2} \right) \theta(\xi) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(f_0 + \frac{b\eta}{2} \right) \theta_0' - \left(f_0' + \frac{b}{2} \right) \theta_0 \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

The constants C_3, C_4 can be optimally derived from

$$\frac{\partial J_2}{\partial C_3} = \frac{\partial J_2}{\partial C_4} = 0 \quad (35)$$

$$\text{where } J_2(C_i) = \int_0^\infty R_2^2(\xi, C_i) d\xi.$$

The results obtained for $f''(0)$ in this work are compared with the solutions obtained in Ref. [32], for validation purposes (see Table 2).

REFERENCES

- [1] C. Xu, L. Yuan, Y. Xu, W. Hang, Squeeze flow of interstitial Herschel-Bulkley fluid between two rigid spheres, *Particuology*. 8(4) (2010) 360–364.
- [2] Rizwan-ul-Haq, Z.H. Khan, S.T. Hussain, Z. Hammouch, Flow and heat transfer analysis of water and ethylene glycol based Cu nanoparticles between two parallel disks with suction/injection effects, *Journal of Molecular Liquids*. 221 (2016) 298–304.
- [3] A.R.A. Khaled, K. Vafai, Hydromagnetic squeezed flow and heat transfer over a sensor surface, *Int. J. Eng. Sci.* 42(5-6) (2004) 509–519.
- [4] M.M. Rashidi, H. Shahmohamadi, S. Dinarvand, Analytic approximate solutions for unsteady two-dimensional and axisymmetric squeezing flows between parallel plates, *Math. Probl. Eng.* (2008) 935095.
- [5] A.M. Siddiqui, S. Irum, A.R. Ansari, Unsteady squeezing flow of a viscous MHD fluid between parallel plates, a solution using the homotopy perturbation method, *Math. Model. Anal.* 13(4) (2008) 565–576.
- [6] F.N. Ibrahim, M. Terbeche, Solutions of the laminar boundary layer equations for a conducting power law non-Newtonian fluid in a transverse magnetic field, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 27(4) (1994) 740–747.
- [7] T. Watanabe, I. Pop, Thermal boundary layers in magnetohydrodynamic flow over a flat plate in the presence of a transverse magnetic field, *Acta Mech.* 105(1-4) (1994) 233–238.
- [8] A.R.A. Khaled, K. Vafai, Heat transfer and hydromagnetic control of flow exit conditions inside oscillatory squeezed thin films, *Numer. Heat Transfer. Part A*. 43(3) (2003) 239–258.
- [9] S.U.S. Choi, Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition San Francisco, USA, ASME. FED 231/MD*. 66 (1995) 99–105.
- [10] N. Zhao, J. Yang, H. Li, Z. Zhang, S. Li, Numerical investigations of laminar heat transfer and flow performance of Al_2O_3 –water nanofluids in a flat tube, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 92 (2016) 268–282.

- [11] **M.H. Aghabozorg, A. Rashidi, S. Moham-madi**, Experimental investigation of heat transfer enhancement of Fe_2O_3 -CNT/water magnetic nano-fluids under laminar, transient and turbulent flow inside a horizontal shell and tube heat exchanger, *Experimental Thermal and Fluid Sci.* 72 (2016) 182–189.
- [12] **A. Aghanajafi, D. Toghraie, B. Mehmam-doust**, Numerical simulation of laminar forced convection of water-CuO nanofluid inside a triangular duct, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 85 (2017) 103–108.
- [13] **A.B. Rosmila, R. Kandasamy, I. Muhaimin**, Lie symmetry group transformation for MHD natural convection flow of nanofluid over linearly porous stretching sheet in presence of thermal stratification, *Applied Mathematics and Mechanics (English Edition)*. 33(5) (2012) 593–604.
- [14] **I. Muhaimin, R. Kandasamy, I. Hashim**, Thermophoresis and chemical reaction effects on non-Darcy MHD mixed convective heat and mass transfer past a porous wedge in the presence of variable stream condition, *Chemical Engineering Research and Design*. 87(11) (2009) 1527–1535.
- [15] **R. Kandasamy, P.G. Palanimani**, Effects of chemical reactions, heat, and mass transfer on non-linear magnetohydrodynamic boundary layer flow over a wedge with a porous medium in the presence of Ohmic heating and viscous dissipation, *Journal of Porous Media*. 10(10) (2007) 489–501.
- [16] **R.U. Haq, S. Nadeem, Z.H. Khan, N.F.M. Noor**, Convective heat transfer in MHD slip flow over a stretching surface in the presence of carbon nanotubes, *Phys. B: Condens. Matter*. 457(2015) 40–47.
- [17] **R. Ellahi, T. Hayat, F.M. Mahomed, A. Zeeshan**, Exact solutions of flows of an Oldroyd 8-constant fluid with nonlinear slip conditions, *Z. Naturforschung A*. 65(12) (2010) 1081–1086.
- [18] **S. Nadeem, R.U. Haq, Z.H. Khan**, Numerical study of MHD boundary layer flow of a Maxwell fluid past a stretching sheet in the presence of nanoparticles, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* 45 (1) (2014) 121–126.
- [19] **R.E.M. Khan**, Exact solution for oscillatory rotating flows of a generalized Oldroyd-B fluid through porous medium, *J. Porous Media*. 12 (8) (2009) 777–788.
- [20] **H. Masuda, A. Ebata, K. Teramae, N. Hishinuma**, Alteration of thermal conductivity and viscosity of liquid by dispersed ultra-fine particles (dispersion of Al_2O_3 , SiO_2 and TiO_2 ultra-fine particles), *Netsu Bussei (Japan)*. 7(4) (1993) 227–233.
- [21] **S.U.S. Choi**, Enhancing Thermal Conductivity of Fluids with Nanoparticles, USA, ASME. FED 231/MD. 66 (1995) 99–105.
- [22] **A. Karimipour, A. Taghipour, A. Malvandi**, Developing the laminar MHD forced convection flow of water/FMWNT carbon nanotubes in a microchannel imposed the uniform heat flux, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 419 (2016) 420–428.
- [23] **A. Shahsavari, M. Saghafi, M.R. Salimpour, M.B. Shafii**, Experimental investigation on laminar forced convective heat transfer of ferrofluid loaded with carbon nanotubes under constant and alternating magnetic fields, *Experimental Thermal and Fluid Sci.* 76 (2016) 1–11.
- [24] **M. Nojoomizadeh, A. Karimipour**, The effects of porosity and permeability on fluid flow and heat transfer of multi walled carbon nano-tubes suspended in oil (MWCNT/Oil nano-fluid) in a microchannel filled with a porous medium, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostru.* 84 (2016) 423–433.
- [25] **A.D. Mansrah, U.A. Al-Mubaiyedh, T. Lau, et. al.**, Heat transfer enhancement of nanofluids using iron nanoparticles decorated carbon nanotubes, *Applied Thermal Engg.* 107 (2016) 1008–1018.
- [26] **M. Imtiaz, T. Hayat, A. Alsaedi, B. Ahmad**, Convective flow of carbon nanotubes between rotating stretchable disks with thermal radiation effects, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 101 (2016) 948–957.
- [27] **M.M. Rashidi, N. Freidoonimehr, A. Hosseini, O. Anwar Bég, T.-K. Hung**, Homotopy simulation of nanofluid dynamics from a nonlinearly stretching isothermal permeable sheet with transpiration, *Meccanica*. 49(2) (2014) 469–482.
- [28] **A.R.A. Khaled, K. Vafai**, Hydromagnetic squeezed flow and heat transfer over a sensor surface, *Int. J. Eng. Sci.* 42(5-6) (2004) 509–519.
- [29] **J.C. Maxwell**, A treatise on electricity and magnetism, 2nd edition, Clarendon Press, Oxford, UK (1881).
- [30] **J.C. Maxwell**, A treatise on electricity and magnetism Oxford University Press, London, UK (1904) 435–441.
- [31] **D. Pal and G. Mandal**, Influence of thermal radiation on mixed convection heat and mass transfer stagnation-point flow in nanofluids over stretching / shrinking sheet in a porous medium with chemical reaction, *Nuclear Engineering and Design*. 273 (2014) 644–652.
- [32] **R.U. Haq, S. Nadeem, Z.H. Khan, N.F.M. Noor**, MHD squeezed flow of water functionalized metallic nanoparticles over a sensor surface, *Physica E*. 73 (2015) 45–53.

Received 01.06.2017, accepted 09.10.2017.



THE AUTHORS

KANDASAMY Ramasamy

Research Centre for Computational Mathematics, Tun Hussein Onn University of Malaysia, Parit Raja, Malaysia.

86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
future990@gmail.com

ZAILANI Nanasha A.B.M.

Research Centre for Computational Mathematics, Tun Hussein Onn University of Malaysia, Parit Raja, Malaysia.

86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
natashaazailani@yahoo.com

FATIHA Fatin N.B.J.

Research Centre for Computational Mathematics, Tun Hussein Onn University of Malaysia, Parit Raja, Malaysia.

86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
fatinurfatiha93@gmail.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Xu C., Yuan L., Xu Y., Hang W. Squeeze flow of interstitial Herschel-Bulkley fluid between two rigid spheres // *Particuology*. 2010. Vol. 8. No. 4. Pp. 360–364.
2. Haq R.U., Khan Z.H., Hussain S.T., Hammouch Z. Flow and heat transfer analysis of water and ethylene glycol based Cu nanoparticles between two parallel disks with suction/injection effects // *Journal of Molecular Liquids*. 2016. Vol. 221. Pp. 298–304.
3. Khaled A.R.A., Vafai K. Hydromagnetic squeezed flow and heat transfer over a sensor surface // *Int. J. Eng. Sci.* 2004. Vol. 42 No. 5–6. Pp. 509–519.
4. Rashidi M.M., Shahmohamadi H., Dinarvand S. Analytic approximate solutions for unsteady two-dimensional and axisymmetric squeezing flows between parallel plates // *Math. Probl. Eng.* 2008. No. 935095.
5. Siddiqui A.M., Irum S., Ansari A.R. Unsteady squeezing flow of a viscous MHD fluid between parallel plates, a solution using the homotopy perturbation method // *Math. Model. Anal.* 2008. Vol. 13. No. 4. Pp. 565–576.
6. Ibrahim F.N., Terbeche M. Solutions of the laminar boundary layer equations for a conducting power law non-Newtonian fluid in a transverse magnetic field // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1994. Vol. 27. No. 4. Pp. 740–747.
7. Watanabe T., Pop I. Thermal boundary layers in magnetohydrodynamic flow over a flat plate in the presence of a transverse magnetic field // *Acta Mech.* 1994. Vol. 105. No. 1–4. Pp. 233–238.
8. Khaled A.R.A., Vafai K. Heat transfer and hydromagnetic control of flow exit conditions inside oscillatory squeezed thin films // *Numer. Heat Transfer. Part A*. 2003. Vol. 43. No. 3. Pp. 239–258.
9. Choi S.U.S. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles // *International Mechanical Engineering Congress and Exposition San Francisco. USA. ASME. FED 231/MD*. 1995. Vol. 66. Pp. 99–105.
10. Zhao N., Yang J., Li H., Zhang Z., Li S. Numerical investigations of laminar heat transfer and flow performance of Al_2O_3 -water nanofluids in a flat tube // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016. Vol. 92. Pp. 268–282.
11. Aghabozorg M.H., Rashidi A., Mohammadi S. Experimental investigation of heat transfer enhancement of Fe_2O_3 -CNT/water magnetic nanofluids under laminar, transient and turbulent flow inside a horizontal shell and tube heat exchanger // *Experimental Thermal and Fluid Sci.* 2016. Vol. 72. Pp. 182–189.
12. Aghanajafi A., Toghrarie D., Mehmandoust B. Numerical simulation of laminar forced convection of water-CuO nanofluid inside a triangular duct // *Phys. E*. 2017. Vol. 85. Pp. 103–108.
13. Rosmila A.B., Kandasamy R., Muhaimin I. Lie symmetry group transformation for MHD natural convection flow of nanofluid over linearly porous stretching sheet in presence of thermal stratification // *Applied Mathematics and Mechanics (Eng. Ed.)*. 2012. Vol. 33. No. 5. Pp. 593–604.
14. Muhaimin I., Kandasamy R., Hashim I. Thermophoresis and chemical reaction effects on non-Darcy MHD mixed convective heat and mass transfer past a porous wedge in the presence of variable stream condition // *Chem. Eng. Res. and Des.* 2009. Vol. 87. No. 11. Pp. 1527–1535.

15. **Kandasamy R., Palanimani P.G.** Effects of chemical reactions, heat, and mass transfer on nonlinear magnetohydrodynamic boundary layer flow over a wedge with a porous medium in the presence of Ohmic heating and viscous dissipation // *Journal of Porous Media*. 2007. Vol. 10. No. 5. Pp. 489–501.
16. **Haq R.U., Nadeem S., Khan Z.H., Noor N.F.M.** Convective heat transfer in MHD slip flow over a stretching surface in the presence of carbon nanotubes // *Phys. B*. 2015. Vol. 457. Pp. 40–47.
17. **Ellahi R., Hayat T., Mahomed F.M., Zee-shan A.** Exact solutions of flows of an Oldroyd 8 – constant fluid with nonlinear slip conditions // *Z. Naturforschung A*. 2010. Vol. 65. No. 12. Pp. 1081–1086.
18. **Nadeem S., Haq R.U., Khan Z.H.** Numerical study of MHD boundary layer flow of a Maxwell fluid past a stretching sheet in the presence of nanoparticles // *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* 2014. Vol. 45. No. 1. Pp. 121–126.
19. **Khan R.E.M.** Exact solution for oscillatory rotating flows of a generalized Oldroyd-B fluid through porous medium // *J. Porous Media*. 2009. Vol. 12. No. 8. Pp. 777–788.
20. **Masuda H., Ebata A., Teramae K., Hishinuma N.** Alteration of thermal conductivity and viscosity of liquid by dispersed ultrafine particles (dispersion of Al_2O_3 , SiO_2 and TiO_2 ultrafine particles) // *Netsu Bussei (Japan)*. 1993. Vol. 7. No. 4. Pp. 227–233.
21. **Choi S.U.S.** Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles // USA. ASME. FED 231/MD. 1995. Vol. 66. Pp. 99–105.
22. **Karimipour A., Taghipour A., Malvandi A.** Developing the laminar MHD forced convection flow of water/FMWNT carbon nanotubes in a microchannel imposed the uniform heat flux // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2016. Vol. 419. Pp. 420–428.
23. **Shahsavari A., Saghaian M., Salimpour M.R., Shafii M.B.** Experimental investigation on laminar forced convective heat transfer of ferrofluid loaded with carbon nanotubes under constant and alternating magnetic fields // *Experimental Thermal and Fluid Sci.* 2016. Vol. 76. Pp. 1–11.
24. **Nojoomizadeh M., Karimipour A.** The effects of porosity and permeability on fluid flow and heat transfer of multi walled carbon nanotubes suspended in oil (MWCNT/Oil nanofluid) in a microchannel filled with a porous medium // *Physica E*. 2016. Vol. 84. Pp. 423–433.
25. **Mansrahi A.D., Al-Mubaiyedi U.A., Lau T., et. al.** Heat transfer enhancement of nanofluids using iron nanoparticles decorated carbon nanotubes // *Applied Thermal Eng.* 2016. Vol. 107. Pp. 1008–1018.
26. **Imtiaz M., Hayat T., Alsaedi A., Ahmad B.,** Convective flow of carbon nanotubes between rotating stretchable disks with thermal radiation effects // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016. Vol. 101. Pp. 948–957.
27. **Rashidi M.M., Freidoonimehr N., Hosseini A., Anwar Bég O., Hung T.-K.** Homotopy simulation of nanofluid dynamics from a non-linearly stretching isothermal permeable sheet with transpiration // *Meccanica*. 2014. Vol. 49. No. 2. Pp. 469–482.
28. **Khaled A.R.A., Vafai K.,** Hydromagnetic squeezed flow and heat transfer over a sensor surface // *Int. J. Eng. Sci.* 2004. Vol. 42. No. 5–6. Pp. 509–519.
29. **Maxwell J.C.,** A Treatise on electricity and magnetism: 2nd edition. Oxford: Clarendon Press, 1881.
30. **Maxwell J.C.,** A Treatise on electricity and magnetism. London: Oxford University Press, 1904. Pp. 435–441.
31. **Pal D., Mandal G.** Influence of thermal radiation on mixed convection heat and mass transfer stagnation-point flow in nanofluids over stretching / shrinking sheet in a porous medium with chemical reaction // *Nuclear Engineering and Design*. 2014. Vol. 273. Pp. 644–652.
32. **Hag R.U., Nadeem S., Khan Z.H., Noor N.F.M.** MHD squeezed flow of water functionalized metallic nanoparticles over a sensor surface // *Physica E*. 2015. Vol. 73. Pp. 45–53.

Статья поступила в редакцию 01.06.2017, принята к публикации 09.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАНДАСАМИ Рамасами – сотрудник Исследовательского центра вычислительной математики Малайзийского университета Туна Хусейна Онна, г. Парит Раджа, Малайзия.

86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
future990@gmail.com

ЗАЙЛАНИ Наташа Амира Бинти Мод – сотрудник Исследовательского центра вычислительной математики Малайзийского университета Туна Хусейна Онна, г. Парит Раджа, Малайзия.

86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
natashaazailani@yahoo.com

ФАТИХА Фатин Нур Бинти Джафар — сотрудник *Исследовательского центра вычислительной математики Малайзийского университета Туна Хусейна Онна, г. Парит Раджа, Малайзия.*
86400 Parit Raja, Batu Pahat, Johor, Malaysia
fatinurfatiha93@gmail.com

DOI: 10.18721/JPM.10404

UDC 536.24.08

CHEMICAL REACTION AND THERMAL RADIATION EFFECTS ON A BOUNDARY LAYER FLOW OF NANOFLUID OVER A WEDGE WITH VISCOUS AND OHMIC DISSIPATION

A.K. Pandey^{1,2}, M. Kumar²

¹ Roorkee Institute of Technology, Roorkee, India;

² G.B. Pant University of Agriculture and Technology, Pantnagar, India

In this article, we have analyzed the influence of a chemical reaction and thermal radiation on a magnetohydrodynamic (MHD) flow of (Cu – water) nanofluid past a wedge in the occurrence of viscous and Ohmic dissipation. The nonlinearity numerical approach called the Runge – Kutta – Fehlberg method of the 4th–5th order was used with shooting technique to find the results of velocity, temperature and concentration fields for several points of the parameters taken. The skin friction coefficient, the Nusselt and the Sherwood numbers were examined in details and the results were presented in graphic and tabular forms. An analysis of the obtained results revealed that the concentration boundary layer thickness diminishes with an increase in the values of the chemical reaction parameter and the velocity profiles increase with increasing the magnetic field parameter.

Keywords: chemical reaction; nanofluid; Ohmic dissipation; thermal radiation; viscous dissipation

Citation: A.K. Pandey, M. Kumar, Chemical reaction and thermal radiation effects on a boundary layer flow of nanofluid over a wedge with viscous and Ohmic dissipation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 54–72. DOI: 10.18721/JPM.10404

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ И ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ ПОТОКА НАНОЖИДКОСТИ, ОБТЕКАЮЩЕГО КЛИН С ВЯЗКОЙ И ОМИЧЕСКОЙ ДИССИПАЦИЯМИ

А.К. Панди^{1,2}, М. Кумар²

¹ Индийский технологический институт Рурки, г. Рурки, Индия;

² Университет сельского хозяйства и технологии им. Г.Б. Панта, г. Пантнагар, Индия

В статье проанализировано влияние теплового излучения и химической реакции на свойства магнитогидродинамического (МГД) потока наножидкости (наночастицы меди в воде), обтекающего твердый клин с вязкой и омической диссипациями. Для нахождения профилей скорости, температуры и концентрации наночастиц для нескольких значений заданных параметров использовано нелинейное численное приближение, называемое методом Рунге – Кутты – Фельберга 4-го и 5-го порядков с математическим пристреливанием. Значения коэффициента поверхностного трения, чисел Нуссельта и Шервуда детально изучены, и результаты представлены в виде графиков и таблиц. Анализ полученных расчетных результатов привел к заключению, что толщина концентрационного граничного слоя потока снижается с увеличением параметра реакции, а скорости потока растут с увеличением параметра магнитного поля.

Ключевые слова: химическая реакция; наножидкость; омическая диссипация; тепловое излучение; вязкая диссипация



Ссылка при цитировании: Панди А.К., Кумар М. Влияние химической реакции и теплового излучения на характеристики пограничного слоя потока наножидкости, обтекающего клин с вязкой и омической диссипациями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 54–72. DOI: 10.18721/JPM.10404

1. Introduction

Due to low thermal conductivity, conventional fluids like water, ethylene glycol and oil have a restricted cooling performance. Choi [1] illustrated that this restricted cooling performance can be determined by the addition of a small amount of high-heat transfer performance of solid nanoparticles to the traditional fluid to form the so-called nanofluids. Typically, the particles in such nanofluids have dimensions ranging from 1 to 100 nm and take the form of metals, oxides, carbides, nitrides or nonmetals. There are several engineering and physical applications of heat transfer in nanofluid such as engine cooling, refrigerators, chillers, microelectronics, fuel cells, etc.

Magnetic nanofluid is a magnetic colloidal suspension of carrier liquid and magnetic nanoparticles. The assistance of magnetic nanofluid is that fluid flow and heat transfer can be managed with the aid of an external source, which makes it pertinent to several areas such as aerospace, electronic packing and thermal engineering. In other words, flow behavior is heavily affected by the intensity and orientation of the applied magnetic field. The applied magnetic field influences the suspended particles and reshuffles their concentration within the fluid, which convincingly alters the flow characteristics of heat transfer. Alternatively, the study of magnetohydrodynamic (MHD) flow for an electrically conducting fluid flow over a heated wedge surface has a lot of significant applications in engineering fields such as nuclear reactors cooling, MHD power generators, studies of plasma and petroleum engineering. Moreover, magnetohydrodynamics is also used in metallurgical processes and boundary layer flow. The effects of MHD flow past a wedge surface due to nanofluid have been analyzed in a few studies.

Ariel [2] studied the influence of the magnetic field on laminar flow of two-dimensional incompressible glutinous fluid impinging normal to the plane. The author established that with increasing values of the Hartmann num-

ber, the shear stress rate increases as well. The effect of suction/injection on a two-dimensional steady nanofluid MHD flow due to a vertical wedge in the existence of mixed convection and chemical reaction was studied by Ganapathirao et al. [3]. Rahman et al. [4] described the impact of heat generation/absorption on a two-dimensional steady nanofluid flow over a wedge with convective surface. They discovered that the Nusselt number increased with increasing values of the Biot number and slip parameter. Srinivasacharya et al. [5] have proposed the effect of heat and mass transfer rate on MHD flow over a wedge within the nanofluid. Rahman et al. [6] investigated the simultaneous impact of heat and mass transfer on an unsteady MHD flow of nanofluid over a wedge surface with thermophoresis and variable electric conductivity. Yacob et al. [7] have considered a flow of nanofluid over a stationary or a **moving wedge**. **The impact of viscous dissipation with a slip wall on an unsteady MHD flow over a stretching wedge for nanofluid have been described by Nagendramma et al. [8].** Kandasamy et al. [9] considered the influence of thermal radiation on an unsteady MHD flow of nanofluid over a porous wedge. Recently, we [10] have analyzed the influence of suction/injection on MHD flow of nanofluid due to a porous wedge in the existence of viscous dissipation and slip. We revealed that the skin friction coefficient increases with an increase in the Eckert number. Then we [11] have illustrated the effect of natural convection and viscous dissipation on nanofluid flow due to a stretching cylinder with thermal radiation, porous medium and slip boundary conditions. Khanafer et al. [12] have examined heat transfer enhancement of nanofluid due to an enclosure using the single-phase model. Further, the single-phase model was used to determine the heat transfer rate of nanofluid due to different geometry by Buongiorno [13], Tiwari and Das [14]. Sheikholeslami and Abelman [15] examined the impact of the magnetic field on a nanofluid flow due to two coaxial cylinders

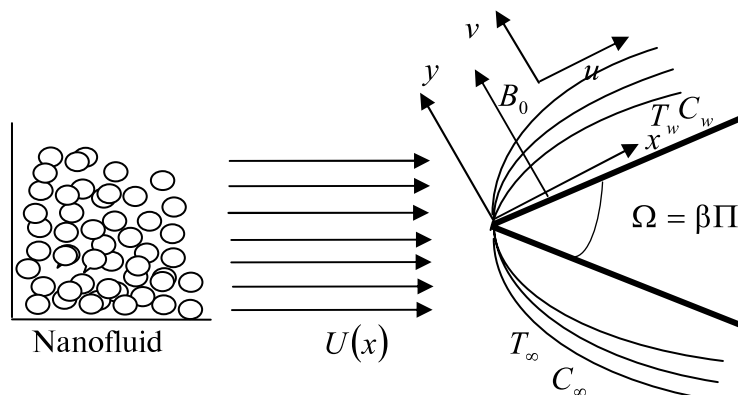


Fig. 1. Physical model of the flow over a wedge surface and the coordinate system: $U(x)$ is the uniform velocity, B_0 is the uniform magnetic field, Ω is the total wedge angle, T is the temperature, C is the specific heat

by applying the two-phase model. Again, the impact of MHD flow of nanofluid over different surfaces has been described in several studies [16 – 38]. We [39] have investigated the numerical solution of nanofluid flow past a stretching cylinder under slip conditions. Hayat et al. [40] have examined the mixed convection stagnation point flow of tangent hyperbolic nanofluid towards a stretching sheet. Mustafa et al. [41] have solved the problem of nanofluid flow within a channel with compliant walls by the Homotopy Analysis Method (HAM) and the shooting method.

Several chemically reacting systems incorporate both homogeneous and heterogeneous reactions, with instances happening in catalysis, combustion and biochemical systems. The interaction between homogeneous reactions within the bulk of the fluid and heterogeneous reactions occurring on some catalytic surfaces is usually extremely complex and is relevant in the production and consumption of reactant species at various rates both in the fluid and surfaces of catalytic. Stagnation-point boundary layer flow due to homogeneous and heterogeneous reactions was studied by Chaudhary and Merkin [42]. Similarly, several studies [43 – 50] revealed the influence of homogeneous and heterogeneous reactions on different types of fluid for different geometry.

The present work deals with the influence of viscous and Ohmic dissipation on a two-dimensional steady nanofluid MHD flow past

a wedge surface in the existence of thermal radiation and chemical reaction.

To the best of our knowledge, no recent studies have been completed on this subject. The numerical solution of the recent study was acquired by applying the shooting method based on the Runge – Kutta – Fehlberg scheme. The influence of different pertinent parameters on flow field, thermal field and concentration were considered graphically and described in details. The boundary layer flow due to a wedge surface plays a key role in the field of crude oil extraction, heat exchangers, ground water pollution, geothermal systems, etc.

2. Mathematical formulation

We assume the existence of a steady flow of two-dimensional and incompressible conventional water-based nanofluid, including copper (Cu) as nanoparticles that moves over the surface of a wedge with a uniform velocity $U(x)$, and a variable magnetic field

$$B(x) = B_0 x^{\frac{(m-1)}{2}},$$

(B_0 is a magnetic field of a uniform strength); the external flow velocity has the form

$$U(x) = u_0 x^m,$$

where u_0 is a constant (see Ref. [5]), whereas

$$m = \frac{\beta}{2 - \beta}$$

is the power-law Falkner – Skan parameter

($0 \leq m \leq 1$); $\beta = \Omega / \Pi$ is the pressure gradient parameter also known as the Hartree pressure gradient (Ω is the total wedge angle assuming two dissimilar values of the Hartree parameter β , i.e., with the flow past a horizontal wall $\beta = 0$ ($\Omega = 0^\circ$) and $\beta = 1$ ($\Omega = 180^\circ$) for boundary layer flow near an upright flat plate.

It is assumed that the fluid phase and the solid particles are in a thermal equilibrium state and that they flow with an equal local velocity. The geometry of the present model is shown in Fig. 1.

The conventional equations of continuity, momentum, heat transfer and concentration are expressed as [5]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0; \quad (1)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = U \frac{dU}{dx} + \frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\sigma B^2}{\rho_{nf}} (U - u); \quad (2)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha_{nf} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\mu_{nf}}{(\rho C_p)_{nf}} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\sigma B^2}{(\rho C_p)_{nf}} u^2 - \frac{1}{(\rho C_p)_{nf}} \frac{\partial q_r}{\partial y}; \quad (3)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - K_1 (C - C_\infty). \quad (4)$$

The boundary conditions are as follows:

$$\left. \begin{aligned} u = 0, v = 0, T = T_w, C = C_w \text{ as } y \rightarrow 0; \\ u = u_0 x^m, T = T_\infty, C = C_\infty \text{ at } y \rightarrow \infty, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

where (u, v) are the velocity components along the x and y axes, respectively.

The effective dynamic viscosity μ_{nf} , the effective density ρ_{nf} , the thermal diffusivity α_{nf} , the heat capacitance $(\rho C_p)_{nf}$ and the thermal

conductivity k_{nf} of the nanofluid are defined as [4, 7, 10]:

$$\left. \begin{aligned} \mu_{nf} &= \frac{\mu_f}{(1 - \phi)^{2.5}}, \\ \rho_{nf} &= (1 - \phi)\rho_f + \phi\rho_s, \quad \alpha_{nf} = \frac{k_{nf}}{(\rho C_p)_{nf}}; \\ (\rho C_p)_{nf} &= (1 - \phi)(\rho C_p)_f + \phi(\rho C_p)_s, \\ \frac{k_{nf}}{k_f} &= \frac{k_s + 2k_f - 2\phi(k_f - k_s)}{k_s + 2k_f + \phi(k_f - k_s)}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

where ϕ is the volume fraction of the solid and the subscripts f and s denote the fluid and the solid nanoparticles, respectively. The thermophysical properties of the nanofluid are listed in Table 1.

With the help of the Rosseland approximation, the radiation heat flux is defined as [9]:

$$q_r = -\frac{4\sigma^*}{3k^*} \frac{\partial T^4}{\partial y} \quad (7)$$

where σ^* and k^* are the Stefan – Boltzmann constant and the coefficient of mean absorption; T^4 is the linear sum of temperature and it can be expanded with the help of the Taylor series along with T_∞ :

$$T^4 = T_\infty^4 + 4T_\infty^3(T - T_\infty) + 6T_\infty^2(T - T_\infty)^2 + \dots \quad (8)$$

Vanishing the higher terms of $(T - T_\infty)$ in Eq. (8), we obtain

$$T^4 \cong 4T_\infty^3 T - 3T_\infty^4. \quad (9)$$

Solving Eqs. (7) and (9) we get

$$q_r = -\frac{16T_\infty^3 \sigma^*}{3k^*} \frac{\partial T}{\partial y}. \quad (10)$$

The following nondimensional similarity transformations are introduced [5]:

$$\psi = (v_f x^{m+1})^{1/2} f(\eta), \quad \eta = \left(\frac{u_0 x^{m+1}}{v_f} \right)^{1/2} \frac{y}{x}, \quad (11)$$

Table 1

Thermophysical properties of water and nanoparticles [4, 7]

Substance	ρ , kg/m ³	C_p , J/(kg·K)	k , W/(m·K)
Pure water	997.1	4179	0.613
Copper (Cu)	8933	385	400

Notations: ρ is the density, C_p is the specific heat at the constant pressure, k is the thermal conductivity coefficient.

$$\theta(\eta) = \frac{T - T_\infty}{T_w - T_\infty}, \quad T_w - T_\infty = x\Delta T, \quad (11)$$

$$\chi(\eta) = \frac{C - C_\infty}{C_w - C_\infty}, \quad C_w - C_\infty = x\Delta C,$$

where $\psi(x, y)$ is the stream function written as

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}; \quad (12)$$

$$u = u_0 x^m f',$$

$$v = -\frac{1}{2}(m+1)(v_f u_0 x^{m-1})^{\frac{1}{2}} \times \left[f' + \left(\frac{m-1}{m+1} \right) \eta f' \right]. \quad (13)$$

Now let us substitute Eqs. (6), (10) – (13) into Eqs. (2), (3) and (4), respectively. The following nonlinear ordinary difference equations (ODEs) of momentum, energy and mass transfer are obtained:

$$f''' - \phi_1 \left[m f'^2 - \left(\frac{m+1}{2} \right) f f'' - m \right] + (1-\phi)^{2.5} M(1-f') = 0, \quad (14)$$

$$(1+R)\theta'' + \text{Pr} \frac{k_f}{k_{nf}} \phi_2 \left(\frac{m+1}{2} f \theta' - f' \theta \right) + \text{Ec} f''^2 + \text{MEc}(1-\phi)^{2.5} f'^2 = 0, \quad (15)$$

$$\chi'' + \text{Sc} \left(\frac{m+1}{2} f \chi' - (f' + \gamma) \chi \right) = 0, \quad (16)$$

and boundary conditions (5) turn into the following ones:

$$\left. \begin{aligned} f'(0) &= 0, \quad f(0) = 0, \quad \theta(0) = 1, \\ \chi(0) &= 1 \text{ at } \eta = 0; \\ f' &= 1, \quad \theta = 0, \quad \chi = 0 \text{ as } \eta \rightarrow \infty, \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

where the prime indicates the derivative with respect to η ; the dimensionless parameters are Pr , the Prandtl number; Sc , the Schmidt number; M , the magnetic field parameter; Ec , the Eckert number; R , the radiation parameter; γ , the chemical reaction parameter; ϕ_1, ϕ_2 , the constants, respectively, defined as:

$$\text{Pr} = \frac{\nu_f (\rho C_p)_f}{k_f}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu_f}{D}, \quad M = \frac{\sigma B_0^2}{\rho_f u_0}, \quad (18)$$

$$\text{Ec} = \frac{\mu_{nf} U^2}{k_{nf} (T_w - T_\infty)}, \quad R = \frac{16\sigma^* T_\infty^3}{3k^* k_{nf}},$$

$$\gamma = \frac{U(x) K_1}{x}, \quad (18)$$

$$\phi_1 = (1-\phi)^{2.5} \left[1 - \phi + \phi \frac{\rho_s}{\rho_f} \right],$$

$$\phi_2 = 1 - \phi + \phi \frac{(\rho C_p)_s}{(\rho C_p)_f}.$$

For practical interest, the shear stress rate (the skin friction coefficient C_f), heat transfer rate (the Nusselt number Nu_x) and mass transfer rate (the Sherwood number Sh_x) are expressed as:

$$C_f = \frac{\mu_{nf}}{\rho U^2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0},$$

$$\text{Nu}_x = \left(\frac{kx}{k_f (T_w - T_\infty)} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=0}, \quad (19)$$

$$\text{Sh}_x = \frac{x}{(C_w - C_\infty)} \left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)_{y=0}.$$

Hence, the reduced dimensionless skin friction coefficient, the heat transfer coefficient and the reduced mass transfer coefficient are defined as:

$$(1-\phi)^{2.5} \sqrt{\text{Re}_x} C_f = 2f''(0),$$

$$\frac{\text{Nu}_x}{\sqrt{\text{Re}_x}} \frac{k_f}{k_{nf}} = -(1+R)\theta'(0), \quad (20)$$

$$\frac{\text{Sh}_x}{\sqrt{\text{Re}_x}} \frac{k_f}{k_{nf}} = -\chi'(0)$$

where $\text{Re}_x = xU/\nu_f$ is the local Reynolds number.

3. Numerical method

The nondimensional momentum (Eq. (14)), energy (Eq. (15)) and concentration (Eq. (16)) together with supporting boundary conditions (17) have been dealt with numerical solution by applying the shooting procedure with the 4th – 5th order Runge – Kutta – Fehlberg (RKF) integration formula. For this scheme, we first modify the primary differential equations into

a set of the first order ODEs.

Let us presume that

$$y_1 = \eta, \quad y_2 = f, \quad y_3 = f', \quad y_4 = f'', \\ y_5 = \theta, \quad y_6 = \theta', \quad y_7 = \chi, \quad y_8 = \chi'.$$

Now we obtain a first-order system of Eqs.:

$$\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \\ y_4' \\ y_5' \\ y_6' \\ y_7' \\ y_8' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ y_3 \\ y_4 \\ \phi_1 \left(my_3^2 - \left(\frac{m+1}{2} \right) y_2 y_4 - m \right) - \\ -(1-\phi)^{2.5} M(1-y_3) \\ y_6 \\ \frac{-1}{(1+R)} \left(\phi_2 \text{Pr} \frac{k_f}{k_{nf}} \left(\frac{m+1}{2} y_2 y_6 - y_3 y_5 \right) + \right. \\ \left. + \text{Ec} y_4^2 + (1-\phi)^{2.5} M \text{Ec} y_3^2 \right) \\ y_8 \\ -\text{Sc} \left(\frac{m+1}{2} y_2 y_8 - y_7 (y_3 + \gamma) \right) \end{pmatrix}. \quad (21)$$

The associated initial conditions are:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ q_1 \\ 1 \\ q_2 \\ 1 \\ q_3 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

The system of first-order ODEs (21)

via initial conditions (22) is solved using a 4th – 5th order RKF integration process, and the appropriate values of unknown initial conditions q_1 , q_2 and q_3 are selected and then numerical integration is applied.

Here we contrast the computed values of f' , θ and χ as $\eta \rightarrow \infty$, through the specified boundary conditions

$$f'(\infty) = 1, \quad \theta(\infty) = 0, \quad \chi(\infty) = 0,$$

and regulate the estimated values of q_1 , q_2 and q_3 to gain an excellent approximation for the result. The unknown q_1 , q_2 and q_3 were approximated by Newton's scheme in such a way that boundary conditions were obeyed at highest numerical values of $\eta \rightarrow \infty$, with an error less than 10^{-8} .

4. Validation of the code

To check the accuracy of our present code, we compared the obtained results of the skin friction coefficient ($f''(0)$), for several values of the magnetic field parameter M , in the absence of thermal radiation, the viscous and Ohmic dissipation and the chemical reaction parameter for the base fluid (water) with the data obtained by Ariel [2] and Srinivasacharya et al. [5]. Notice that our results are in better agreement, as shown in Table 2. Therefore, using our recent code is valid for computation.

5. Results and discussion

The solutions of the nondimensional velocity field $f'(\eta)$, the temperature field $\theta(\eta)$, the concentration $\chi(\eta)$, the skin factor C_f , the Nusselt number Nu_x , and the Sherwood number Sh_x profiles were obtained for several values of related parameters, throughout the procedure with the step length $\Delta\eta = 0.001$, where $0 \leq \eta \leq 3$. Notice that for the base fluid ($\phi = 0$), the value of the constants ϕ_1 and ϕ_2 becomes unity. The present model will be the same as the one presented by Srinivasacharya et al. [5] in the absence of viscous and Ohmic dissipation, thermal radiation and chemical reaction.

The changes in the dimensionless parameters such as the skin friction, the Nusselt number and the Sherwood number are presented in Table 3. This data reveals that the skin friction coefficient and the mass transfer rate of the

Table 2

Comparison of the values of the skin friction coefficient $f''(0)$ for different values of the magnetic field parameter M

M	$f''(0)$		
	Ariel [2]	Srinivasacharya et al. [5]	Present study
0	1.232588	1.2325965196	1.2328130
1	1.585331	1.5852800424	1.5853650
4	2.346663	2.3468696599	2.3466556
25	5.147965	5.1479646032	5.1479628
100	10.074741	10.0747411168	10.0747412

The data is given in the absence of thermal radiation, the viscous and Ohmic dissipation and the chemical reaction parameter, whereas $\phi = 0$, $Ec = 0$, $m = 1$, $Pr = 1$, $R = 0$, $Sc = 0.24$ and $\gamma = 0$.

Table 3

Values of the skin friction coefficient, the Nusselt number and the Sherwood number for different values of the magnetic field parameter M

M	$f''(0)$	$-\theta'(0)$	$-\chi'(0)$
0.2	1.499681	0.600960	0.680420
0.6	1.598197	0.592030	0.683610
1.0	1.691074	0.582014	0.686460
2.0	1.903826	0.553324	0.692502
3.0	2.095334	0.520750	0.697402

Notations: $f''(0)$ is the skin friction coefficient, $-\theta'(0)$ is the Nusselt number, $\chi'(0)$ is the Sherwood number.

Fixed parameter values: $Ec = 0.1$, $m = 1$, $Pr = 1$, $R = 0.5$, $Sc = 0.24$, $\phi = 0.1$, $\gamma = 1$.

Cu–water nanofluid increase with increasing the magnetic field parameter M . Moreover, the heat transfer rate decelerates with an increase in M .

Table 4 indicates that the Sherwood number depends on the chemical reaction parameter γ . We can see that the mass transfer rate of nanofluid accelerates with increasing γ . The

Table 4

Values of the Sherwood number for different values of the chemical reaction parameter γ

γ	$-\chi'(0)$
0	0.518711
5	1.165433
20	2.213661
40	3.110745
50	3.474195
60	3.803274

Fixed parameter values: $Ec = 0.1$, $M = 0.6$, $m = 1$, $Pr = 1$, $R = 0.5$, $Sc = 0.24$, $\phi = 0.1$.

Table 5

Values of the Nusselt number for different values of the radiation parameter R

R	$-\theta'(0)$
0	0.454424
1	0.421124
4	0.378224
12	0.352560
20	0.345560

Fixed parameter values: $\gamma = 1$, $Ec = 0.1$, $M = 0.6$, $m = 1$, $Pr = 1$, $Sc = 0.24$, $\phi = 0.1$.

heat transfer coefficient in terms of the Nusselt number is given in Table 5 for different values of R . This data signifies that the heat transfer rate decelerates with increasing R . The influence of the related parameters on the velocity, temperature and volume concentration of nanoparticles is illustrated in Figs. 2 – 5. In the recent study we have regarded Cu (copper) as nanoparticles and water as a base fluid. The impact of the magnetic parameter M on the flow field, thermal field and concentration of

Cu–water nanofluid for $Pr = m = 1$, $Ec = \phi = 0.1$, $R = 0.5$, $\gamma = 1$ and $Sc = 0.24$ are shown in Fig. 2. Fig. 2, *a* shows that the velocity field profile of the Cu–water nanofluid increases with increasing the magnetic parameter and it is also obvious from this graph that the momentum boundary layer width of the nanofluid decreases. We used Fig. 2, *b* to conclude that the thermal field component is influenced by the magnetic field parameter M in the domain of $[0, 3]$ and the trend of the

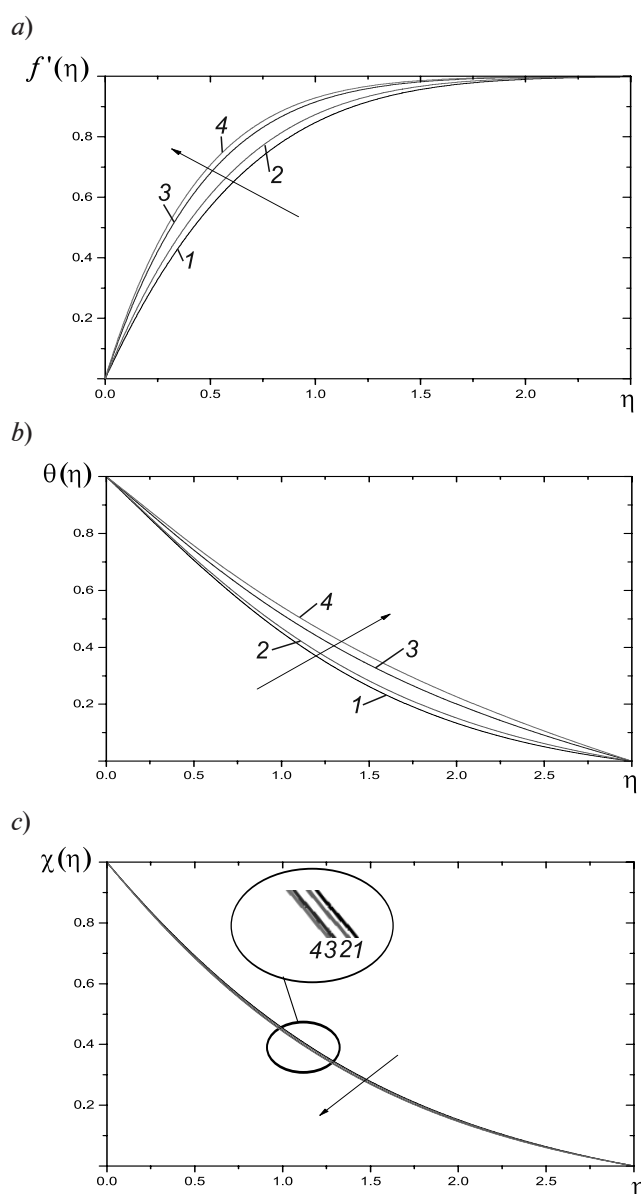


Fig. 2. Velocity (*a*), temperature (*b*) and concentration (*c*) profiles of Cu–water nanofluid for different values of the magnetic field parameter M : 0.2 (1), 1.0 (2), 3.0 (3), 4.0 (4); $Pr = m = 1$, $Ec = \phi = 0.1$, $R = 0.5$, $\gamma = 1$, $Sc = 0.24$

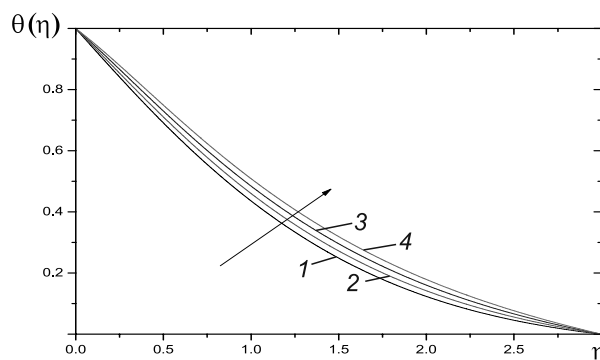


Fig. 3. Temperature profiles of Cu–water nanofluid for different values of the Eckert number Ec : 0 (1), 0.1 (2), 0.2 (3), 0.3 (4); $M = 0.6$, $Pr = m = \gamma = 1$, $R = 0.5$, $\phi = 0.1$

dimensionless temperature profiles increases with increasing M in this entire domain. For this reason, the thermal boundary layer thickness grows to large values. Similarly, we can see from Fig. 2, c that the concentration graph varies with the magnetic parameter corresponding to each value of the horizontal component η .

In the regions of $[0, 0.2]$ and $[2.9, 3.0]$, there is no change in the concentration profile of the Cu–water nanofluid; the fluid concentration subsequently decreases with increasing the values of M in the region of $[0.2, 2.9]$.

The deviation in the temperature distribution corresponding to the horizontal variable η

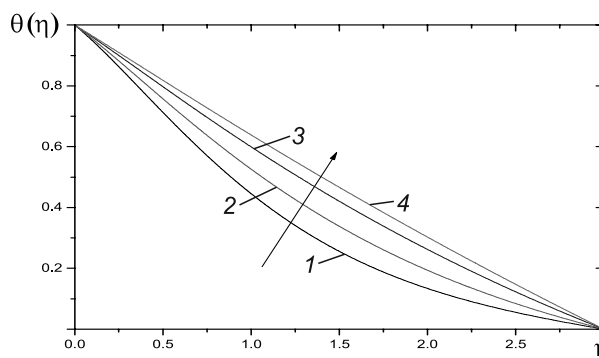


Fig. 4. Temperature profiles of Cu–water nanofluid for different values of the radiation parameter R : 0 (1), 1 (2), 4 (3), 12 (4); $M = 0.6$, $Pr = m = \gamma = 1$, $Ec = 0.3$, $\phi = 0.1$

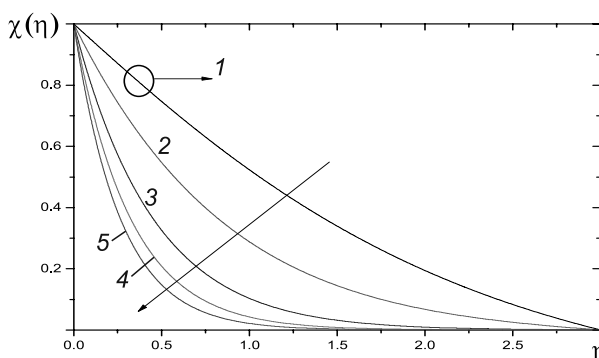


Fig. 5. Concentration profiles of Cu–water nanofluid for different values of the chemical reaction parameter γ : 0 (1), 5 (2), 20 (3), 40 (4), 60 (5); $M = 0.6$, $Pr = m = 1$, $R = 0.5$, $Ec = \phi = 0.1$

for different values of the Eckert number Ec is shown in Fig. 3 for $M = 0.6$, $Pr = m = \gamma = 1$, $R = 0.5$ and $\phi = 0.1$.

We can conclude from this figure that the temperature of the nanoparticles gradually increases with increasing the values of the Eckert number, and for this reason the width of the thermal boundary layer increases. Moreover, the heat transfer rate decreases for different values of the Eckert number Ec .

The graph for the thermal field versus the horizontal axis η for different values of the radiation parameter R with $M = 0.6$, $Pr = m = \gamma = 1$, $Ec = 0.3$ and $\phi = 0.1$ is shown in Fig. 4. It is clear from this figure that the temperature of the nanoparticle increases with increasing thermal radiation parameter, while the heat transfer rate decreases with increasing the R value.

Fig. 5 shows the graph for the concentra-

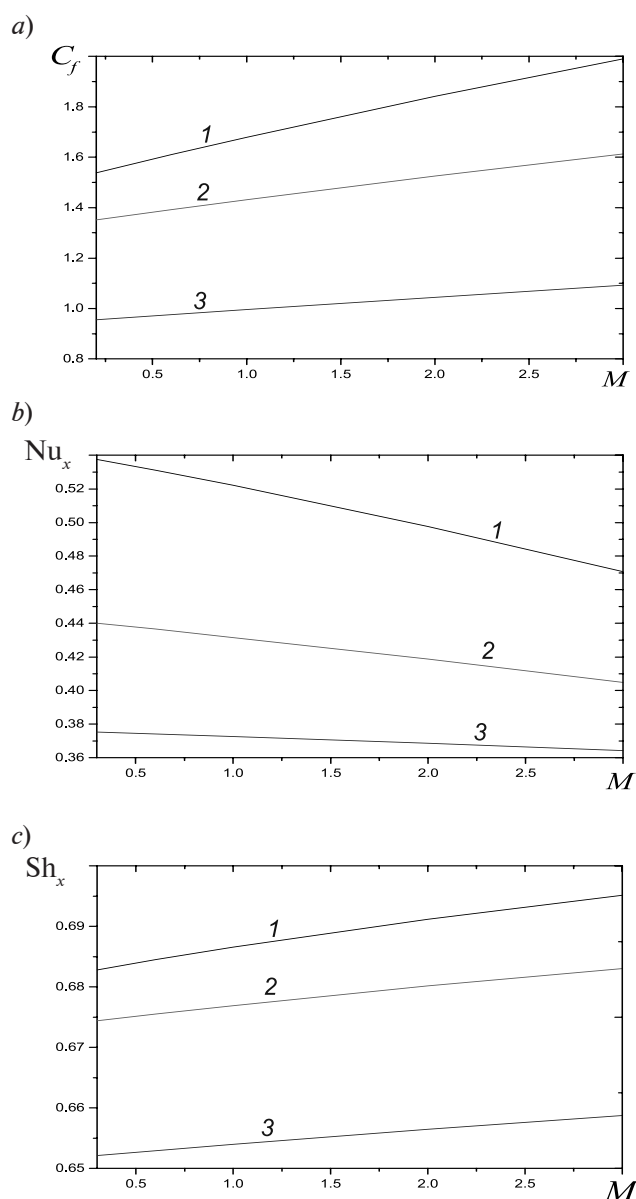


Fig. 6. The plots of the skin friction coefficient (a), the Nusselt (b) and the Sherwood (c) numbers versus M parameter for different values of the solid volume fraction ϕ : 0.2 (1), 0.4 (2), 0.6 (3); $Pr = m = \gamma = 1$, $R = 0.5$, $Ec = 0.1$, $Sc = 0.24$

tion profile of the Cu–water nanofluid versus variable η , for different values of the chemical reaction parameter γ at $M = 0.6$, $Pr = m = 1$, $R = 0.5$ and $Ec = \phi = 0.1$. It can be seen that this concentration profile of the Cu–water nanofluid asymptotically approaches zero in the region of $[0, \infty)$. In other words, it decreases gradually with increasing the chemical reaction parameter γ in the dynamic range of $0 \leq \eta < \infty$; moreover, the curve is asymptotic to the axis of η ; we can also conclude that the concentration boundary layer thickness decreases gradually. However, the mass transfer rate increases monotonically.

The changes in the nondimensional skin friction coefficient, the Nusselt number and the Sherwood number depending on the magnetic field parameter M for different values of the solid volume fraction ϕ are shown in Fig. 6 with the parameter values $Pr = m = \gamma = 1$, $R = 0.5$, $Ec = 0.1$ and $Sc = 0.24$. The influence of the volume fraction ϕ on the skin friction coefficient is demonstrated in Fig. 6, *a*. It can be seen from this graph that each value of the thermal radiation skin friction decreases with increasing the volume concentration of solid particles. The graph of the Nusselt number versus the magnetic field parameter for several values of the solid concentration is shown in Fig. 6, *b*. It can be seen that the heat transfer rate increases with increasing the concentration of solid particles.

The variation in the mass transfer rate with respect to the variable M for different val-

ues of the volume concentration is shown in Fig. 6, *c*. It can be seen that the Sherwood number is an increasing function of ϕ in the domain M .

The effect of the volume concentration along with the thermal radiation parameter R on the Nusselt number is shown in Fig. 7, with the values of nondimensional parameters $Pr = m = \gamma = 1$, $M = 0.6$, $Ec = 0.3$ and $Sc = 0.24$. This figure shows that the heat transfer rate enhances with the solid volume concentration for each value of the radiation parameter.

Fig. 8 shows the changes in velocity, temperature and concentration profiles of the nanofluid for different values of m with $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $Pr = 1$, $R = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$ and $\phi = 0.6$. Fig. 8, *a* shows that the velocity profiles frequently increase with increasing the values of m in the region of $[0, 3]$. Fig. 8, *b* shows that the temperature profiles decrease with increasing m within the domain of $(0.5, 0.9)$. Similarly, it can be seen from Fig. 8, *c* that the concentration profiles of the nanofluid gradually decreased with increasing m in the specified range, and for this reason, the concentration boundary layer thickness decreased.

The influence of the Prandtl number with $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $m = 1$, $R = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$ and $\phi = 0.6$ on the temperature distribution is shown in Fig. 9. We can see from these curves that the temperature profiles gradually decrease with increasing the Prandtl number. Fig. 10 shows the effect of the Schmidt number Sc on

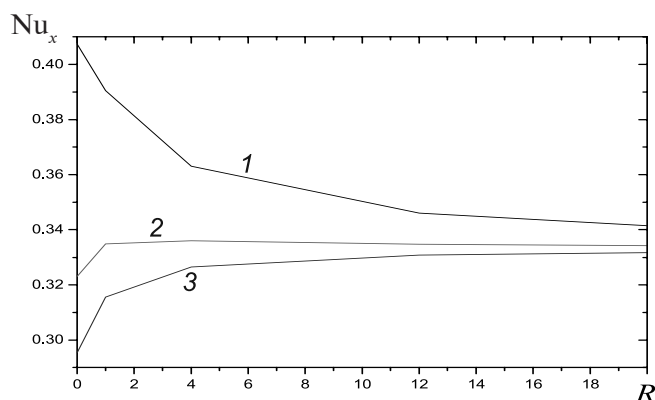


Fig. 7. The plots of the Nusselt number versus R parameter for different values of the solid volume fraction ϕ : 0.2 (1), 0.4 (2), 0.6 (3); $Pr = m = \gamma = 1$, $M = 0.6$, $Ec = 0.3$, $Sc = 0.24$

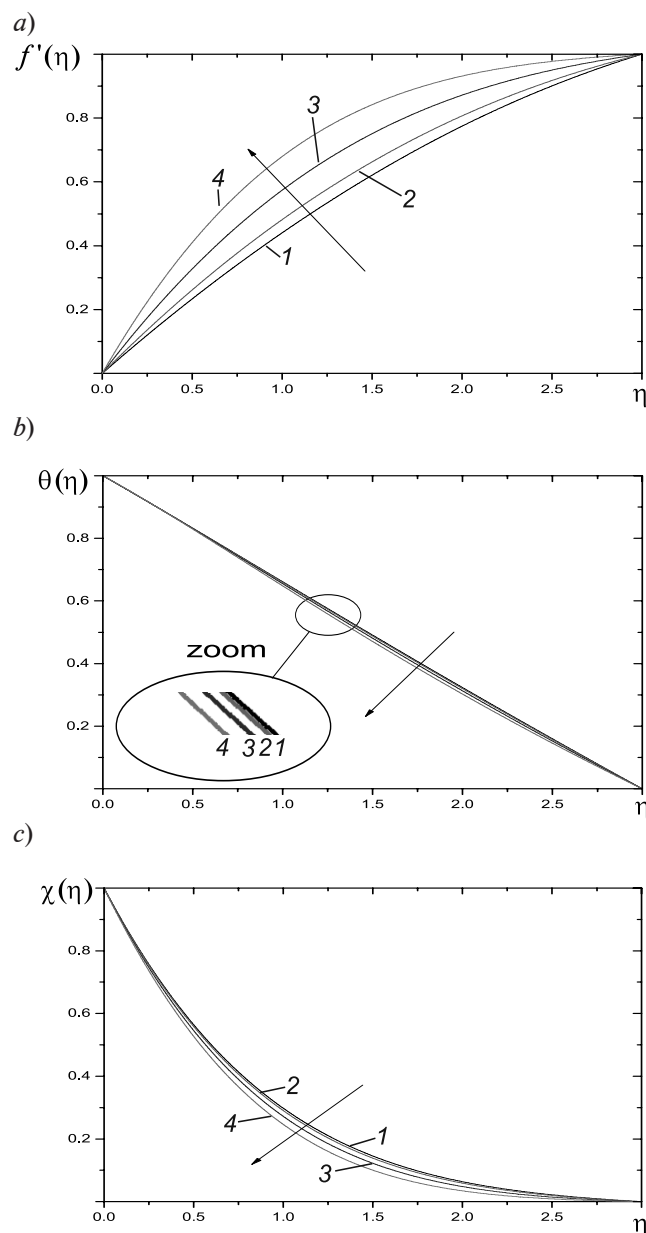


Fig. 8. Velocity (a), temperature (b) and concentration (c) profiles of the nanofluid for different values of the power-law Falkner – Skan parameter m :
 $1/11$ (1), 0.2 (2), 0.5 (3), 1.0 (4);
 $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $Pr = 1$, $R = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$, $\phi = 0.6$

the concentration distribution of the nanofluid with $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $m = 1$, $R = \gamma = 1$, $Pr = 1$ and $\phi = 0.6$. It can be seen from these curves that the concentration profiles increase with increasing the Schmidt number, and for this reason the solution boundary layer thickness decreases with increasing the Sc value.

Table 6 shows the values of the skin fric-

tion coefficient, the Nusselt and the Sherwood numbers due to the effect of m . It can be seen from this data that the mass transfer rate and the shear stress rate increase with increasing m , while the heat transfer rate decreases.

The effects of the Prandtl number on the Nusselt number are described in Table 7. We can conclude from the data that the heat

transfer rate increases along with the Prandtl number.

Table 8 describes the effect of the Schmidt number Sc on the mass transfer rate, which proves that the mass transfer rate is an increasing function of Sc .

The combined effect of the magnetic parameter M and the volume fraction ϕ of nanoparticles on the heat and mass transfer is illustrated in Table 9. It can be seen from the table that the heat transfer rate decreases but the mass transfer rate increases with increasing M for each ϕ value.

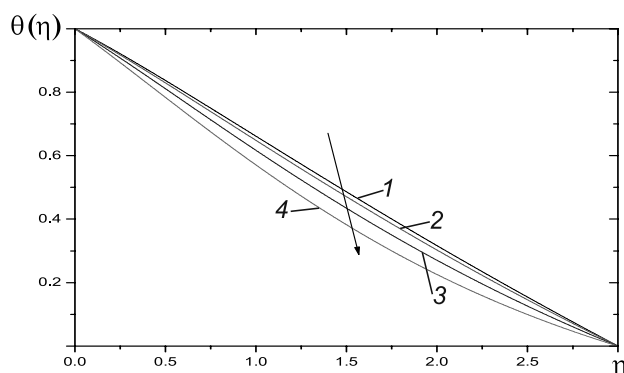


Fig. 9. Temperature profiles for different values of the Prandtl number (Pr):
0.71 (1), 1.00 (2), 1.74 (3), 2.97 (4);
 $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $m = 1$, $R = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$, $\phi = 0.6$

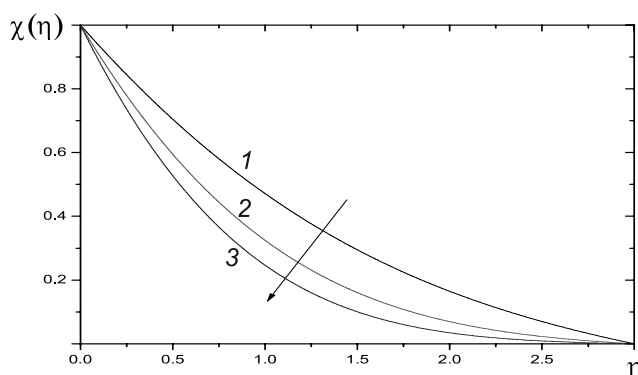


Fig. 10. Concentration profiles for different values of the Schmidt number (Sc):
0.24 (1), 0.60 (2), 0.94 (3);
 $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $m = 1$, $R = \gamma = 1$, $Pr = 1$, $\phi = 0.6$

Table 6

Values of the skin friction coefficient, the Nusselt number and the Sherwood number for different values of m

m	$f''(0)$	$-\theta'(0)$	$-\chi'(0)$
1/11	0.4942973	0.328434	1.083905
0.2	0.5661611	0.327020	1.096231
0.5	0.7403936	0.322560	1.126572
1.0	0.9757923	0.315531	1.169118

Fixed parameter values: $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $Pr = 1$, $R = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$, $\phi = 0.6$

Table 7

Values of the Nusselt number for different values of the Prandtl number

Pr	$-\theta'(0)$
0.71	0.299350
1.00	0.315531
1.74	0.354443
2.97	0.412683

Fixed parameter values: $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $R = m = \gamma = 1$, $Sc = 0.94$, $\phi = 0.6$

Table 8

Values of the Sherwood number for different values of the Schmidt number Sc

Sc	$-\chi'(0)$
0.24	0.6529234
0.60	0.9583910
0.94	1.1694180

Fixed parameter values: $Ec = 0.3$, $M = 0.6$, $Pr = R = m = \gamma = 1$, $\phi = 0.6$

Table 9

Effect of M and ϕ parameters on the Nusselt and the Sherwood numbers

M	$-\theta'(0)$			$-\chi'(0)$		
	$\phi = 0.2$	$\phi = 0.4$	$\phi = 0.6$	$\phi = 0.2$	$\phi = 0.4$	$\phi = 0.6$
0.2	0.539740	0.441265	0.37563	0.682209	0.674028	0.65184
0.6	0.531212	0.436532	0.37416	0.684490	0.675504	0.65292
1.0	0.522150	0.431630	0.37264	0.686579	0.676920	0.65397
2.0	0.497546	0.418689	0.36861	0.691196	0.680160	0.65645
5.0	0.470718	0.404920	0.36433	0.695133	0.683067	0.65875

Fixed parameter values: $Pr = m = \gamma = 1$, $R = 0.5$, $Ec = 0.1$, $Sc = 0.24$

6. Conclusions

In the current study, the effect of viscous and Ohmic dissipation on magnetohydrodynamic flow of nanofluid (Cu – water) past a wedge in the existence of thermal radiation and chemical reaction has been studied. The governing PDEs were transformed into a set of ODEs by employing the corresponding similarity transformations and the transformed equations were solved along with the boundary conditions by the Runge – Kutta – Fehlberg method of the 4th-5th order via the shooting technique.

The following major conclusions can be drawn from the results of our study:

The velocity of the (Cu–water) nanofluid flow increases with increasing the magnetic field parameter;

The thermal boundary layer thickness increases with increasing the magnetic field parameter;

The concentration boundary layer thickness decreases with increasing the chemical reaction parameter;

The temperature profiles of the nanoparticles increase with increasing the Eckert number;

The heat transfer rate decreases with increasing the values of the thermal radiation parameter;

The mass transfer rate increases with increasing chemical reaction parameter;

The skin friction coefficient decreases with increasing the solid volume fraction and the magnetic parameter. Moreover, the opposite behaviour was observed for the Nusselt number and the Sherwood number;

The heat transfer rate increases with increasing the volume fraction, along with the radiation parameter.

Acknowledgements

The authors wish to convey their genuine gratitude to the reviewers for their essential suggestions and comments that helped to improve this manuscript. This study did not receive any specific grant from funding agencies in the public, commercial, or *n*-profit sectors.

REFERENCES

- [1] **S.U.S Choi**, Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles, ASME-Publications-Fed. 231 (1995) 99–106.
- [2] **P.D. Ariel**, Hiemenz flow in hydromagnetics, *Acta Mech.* 103 (1–4) (1994) 31–43.
- [3] **M. Ganapathirao, R. Ravindran**, Nonuniform slot suction/injection into mixed convective MHD flow over a vertical wedge with chemical reaction, *Procedia Eng.* 127 (2015) 1102–1109.
- [4] **M.M. Rahman, M.A. Al-Lawatia, I.A. Eltayeb, N. Al-Salti**, Hydromagnetic slip flow of water based nanofluids past a wedge with convective surface in the presence of heat generation (or) absorption, *Int. J. Therm. Sci.* 57 (2012) 172–182.
- [5] **D. Srinivasacharya, U. Mendu, K. Venumadhav**, MHD boundary layer flow of a nanofluid past a wedge, *Procedia Eng.* 127 (2015) 1064–1070.
- [6] **A.M. Rahman, M.S. Alam, M.A. Alim, M.K. Chowdhury**, Unsteady MHD forced convective heat and mass transfer flow along a wedge with variable electric conductivity and thermophoresis, *Procedia Eng.* 56 (2013) 531–537.
- [7] **N.A. Yacob, A. Ishak, I. Pop**, Falkner–Skan problem for a static or moving wedge in nanofluids, *Int. J. Therm. Sci.* 50 (2) (2011) 133–139.
- [8] **V. Nagendramma, K. Sreelakshmi, G. Sarojamma**, MHD heat and mass transfer flow over a stretching wedge with convective boundary condition and thermophoresis, *Procedia Eng.* 127 (2015) 963–969.
- [9] **R. Kandasamy, I. Muhaimin, A.K. Rosmila**, The performance evaluation of unsteady MHD non-Darcy nanofluid flow over a porous wedge due to renewable (solar) energy, *Renew. Energy.* 64 (2014) 1–9.
- [10] **A.K. Pandey, M. Kumar**, Effect of viscous dissipation and suction/injection on MHD nanofluid flow over a wedge with porous medium and slip, *Alexandria Eng. J.* 55 (4) (2016) 3115–3123.
- [11] **A.K. Pandey, M. Kumar**, Natural convection and thermal radiation influence on nanofluid flow over a stretching cylinder in a porous medium with viscous dissipation, *Alexandria Eng. J.* 56 (1) (2017) 55–62.
- [12] **K. Khanafer, K. Vafai, M. Lightstone**, Buoyancy-driven heat transfer enhancement in a two-dimensional enclosure utilizing nanofluids, *Int. J. Heat Mass Transf.* 46 (19) (2003) 3639–3653.
- [13] **J. Buongiorno**, Convective transport in nanofluids, *ASME J. Heat Transf.* 128 (3) (2006) 240–250.
- [14] **R.K. Tiwari, M.K. Das**, Heat transfer augmentation in two-sided lid-driven differentially heated square cavity utilizing nanofluids, *Int. J. Heat Mass Transf.* 50 (9) (2007) 2002–2018.
- [15] **M. Sheikholeslami, S. Abelman**, Two-phase simulation of nanofluid flow and heat transfer in an annulus in the presence of an axial magnetic field, *IEEE Trans. Nanot.* 14 (3) (2015) 561–569.
- [16] **M. Sheikholeslami, D.D. Ganji, M.M. Rashidi**, Magnetic field effect on unsteady nanofluid flow and heat transfer using Buongiorno model, *J. Magn. Magn. Mater.* 416 (2016) 164–173.
- [17] **T. Hayat, M. Waqas, S.A. Shehzad, A. Alsaedi**, A model of solar radiation and Joule heating in magnetohydrodynamic (MHD) convective flow of thixotropic nanofluid, *J. Mol. Liq.* 215 (2016) 704–710.
- [18] **M. Ziaei-Rad, M. Saeedan, E. Afshari**, Simulation and prediction of MHD dissipative nanofluid flow on a permeable stretching surface using artificial neural network, *Appl. Therm. Eng.* 99 (2016) 373–382.
- [19] **M. Sheikholeslami, T. Hayat, A. Alsaedi**, MHD free convection of Al_2O_3 –water nanofluid considering thermal radiation: a numerical study, *Int. J. Heat Mass Transf.* 96 (2016) 513–524.
- [20] **C. Zhang, L. Zheng, X. Zhang, G. Chen**, MHD flow and radiation heat transfer of nanofluids in porous media with variable surface heat flux and chemical reaction, *Appl. Math. Modell.* 39(1) (2015) 165–181.
- [21] **K. Das, P.R. Duari, P.K. Kundu**, Numerical simulation of nanofluid flow with convective boundary condition, *J. Egypt. Math. Soc.* 23(2) (2015) 435–439.
- [22] **D. Pal, G. Mandal**, Hydromagnetic convective-radiative boundary layer flow of nanofluids induced by a nonlinear vertical stretching/shrinking sheet with viscous–Ohmic dissipation, *Powder Technol.* 279 (2015) 61–74.
- [23] **T. Hayat, M.B. Ashraf, S.A. Shehzad, A. Alsaedi**, Mixed convection flow of Casson nanofluid over a stretching sheet with convectively heated chemical reaction and heat source/sink, *J. Appl. Fluid Mech.* 8 (4) (2015) 803–813.
- [24] **T. Hayat, M.I. Khan, M. Waqas, T. Yasmeen, A. Alsaedi**, Viscous dissipation effect in flow of magnetonanofluid with variable properties, *J. Mol. Liq.* 222 (2016) 47–54.
- [25] **T. Hayat, M.I. Khan, M. Waqas, A. Alsaedi, T. Yasmeen**, Diffusion of chemically reactive species in third grade flow over an exponentially stretching sheet considering magnetic field effects, *Chinese J. Chem. Eng.* 25 (3) (2016) 257–263.
- [26] **H. Upreti, A.K. Pandey, M. Kumar**, MHD flow of Ag–water nanofluid over a flat porous plate



with viscous–Ohmic dissipation, suction/injection and heat generation/absorption, Alexandria Eng. J. (2017) (in press) <https://doi.org/10.1016/j.aej.2017.03.018>.

[27] T. Hayat, A. Shafiq, M. Imtiaz, A. Alsaedi, Impact of melting phenomenon in the Falkner–Skan wedge flow of second grade nanofluid: A revised model, J. Molec. Liq. 215 (2016) 664–670.

[28] T. Hayat, S. Qayyum, M. Imtiaz, A. Alsaedi, Comparative study of silver and copper water nanofluids with mixed convection and nonlinear thermal radiation, Int. J. Heat Mass Transf. 102 (2016) 723–732.

[29] M. Imtiaz, T. Hayat, A. Alsaedi, Mixed convection flow of Casson nanofluid over a stretching cylinder with convective boundary conditions, Adv. Powd. Tech. 27 (5) (2016) 2245–2256.

[30] M. Imtiaz, T. Hayat, A. Alsaedi, Flow of magneto-nanofluid by a radiative exponentially stretching surface with dissipation effect, Adv. Powd. Tech. 27 (5) (2016) 2214–2222.

[31] T. Hayat, S. Qayyum, A. Alsaedi, A. Shafiq, Inclined magnetic field and heat source/sink aspects in flow of nanofluid with nonlinear thermal radiation, Int. J. Heat Mass Transf. 103 (2016) 99–107.

[32] T. Hayat, M. Imtiaz, A. Alsaedi, Melting heat transfer in the MHD flow of Cu–water nanofluid with viscous dissipation and Joule heating, Adv. Powd. Tech. 27(4) (2016) 1301–1308.

[33] M. Sajid, T. Javed, T. Hayat, MHD rotating flow of a viscous fluid over a shrinking surface, Nonlin. Dyn. 51 (1) (2008) 259–265.

[34] K.L. Hsiao, Stagnation electrical MHD nanofluid mixed convection with slip boundary on a stretching sheet, Appl. Therm. Eng. 98 (2016) 850–861.

[35] K.L. Hsiao, Nanofluid flow with multimedia physical features for conjugate mixed convection and radiation, Comp. Fluids. 104 (2014) 1–8.

[36] K.L. Hsiao, To promote radiation electrical MHD activation energy thermal extrusion manufacturing system efficiency by using carreau nanofluid with parameters control method, Energy. 130 (2017) 486–499.

[37] K.L. Hsiao, Micropolar nanofluid flow with MHD and viscous dissipation effects towards a stretching sheet with multimedia feature, Int. J. Heat Mass Transf. 112 (2017) 983–990.

[38] K.L. Hsiao, Combined electrical MHD heat transfer thermal extrusion system using Maxwell fluid with radiative and viscous dissipation effects, Appl. Therm. Eng. 112 (2017) 1281–1288.

[39] A.K. Pandey, M. Kumar, Boundary layer

flow and heat transfer analysis on Cu–water nanofluid flow over a stretching cylinder with slip, Alexandria Eng. J. (2017) (in press) <https://doi.org/10.1016/j.aej.2017.01.017>.

[40] T. Hayat, S. Qayyum, A. Alsaedi, S.A. Shehzad, Nonlinear thermal radiation aspects in stagnation point flow of tangent hyperbolic nanofluid with double diffusive convection, J. Molec. Liq. 223 (2016) 969–978.

[41] M. Mustafa, S. Hina, T. Hayat, A. Alsaedi, Influence of wall properties on the peristaltic flow of a nanofluid: analytic and numerical solutions, Int. J. Heat Mass Transf. 55 (17) (2012) 4871–4877.

[42] M.A. Chaudhary, J.H. Merkin, A simple isothermal model for homogeneous-heterogeneous reactions in boundary-layer flow. I. Equal diffusivities, Fluid Dyn. Res. 16 (6) (1995) 311–333.

[43] M.I. Khan, T. Hayat, M.I. Khan, A. Alsaedi, A modified homogeneous-heterogeneous reactions for MHD stagnation flow with viscous dissipation and Joule heating, Int. J. Heat Mass Transf. 113 (2017) 310–317.

[44] T. Hayat, M. Rashid, M. Imtiaz, A. Alsaedi, Nanofluid flow due to rotating disk with variable thickness and homogeneous-heterogeneous reactions, Int. J. Heat Mass Transf. 113 (2017) 96–105.

[45] A. Tanveer, T. Hayat, A. Alsaedi, B. Ahmad, Mixed convective peristaltic flow of Sisko fluid in curved channel with homogeneous-heterogeneous reaction effects, J. Molec. Liq. 233 (2017) 131–138.

[46] T. Hayat, Z. Hussain, A. Alsaedi, B. Ahmad, Heterogeneous-homogeneous reactions and melting heat transfer effects in flow with carbon nanotubes, J. Molec. Liq. 220 (2016) 200–207.

[47] M. Farooq, A. Anjum, T. Hayat, A. Alsaedi, Melting heat transfer in the flow over a variable thicked Riga plate with homogeneous-heterogeneous reactions, J. Molec. Liq. 224 (2016) 1341–1347.

[48] T. Hayat, Z. Hussain, M. Farooq, A. Alsaedi, Effects of homogeneous and heterogeneous reactions and melting heat in the viscoelastic fluid flow, J. Molec. Liq. 215 (2016) 749–755.

[49] T. Hayat, M.I. Khan, M. Farooq, T. Yasmeen, A. Alsaedi, Stagnation point flow with Cattaneo – Christov heat flux and homogeneous-heterogeneous reactions, J. Molec. Liq. 220 (2016) 49–55.

[50] T. Hayat, M. Imtiaz, A. Alsaedi, F. Alzahrani, Effects of homogeneous–heterogeneous reactions in flow of magnetite- Fe_3O_4 nanoparticles by a rotating disk, J. Molec. Liq. 216 (2016) 845–855.

Received 09.03.2017, accepted 10.10.2017.

THE AUTHORS

PANDEY Alok Kumar

Roorkee Institute of Technology

8th km Dehradun Road, Puhana, Roorkee, Uttarakhand, 247667, India

mr.alokpandey1@gmail.com

KUMAR Manoj

G.B. Pant University of Agriculture and Technology

District-Udham Singh Nagar, Pantnagar, Uttarakhand, 263153, India

mnj_kumar2004@yahoo.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Choi S.U.S. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles // ASME-Publications-Fed. 1995. Vol. 231. Pp. 99–106.
2. Ariel P.D. Hiemenz flow in hydromagnetics // Acta Mech. 1994. Vol. 103. Vol. 1–4. Pp. 31–43.
3. Ganapathirao M., Ravindran R. Nonuniform slot suction/injection into mixed convective MHD flow over a vertical wedge with chemical reaction // Procedia Eng. 2015. Vol. 127. Pp. 1102–1109.
4. Rahman M.M., Al-Lawatia M.A., Eltayeb I.A., Al-Salti N. Hydromagnetic slip flow of water based nanofluids past a wedge with convective surface in the presence of heat generation (or) absorption // Int. J. Therm. Sci. 2012. Vol. 57. Pp. 172–182.
5. Srinivasacharya D., Mendu U., Venumadhav K. MHD boundary layer flow of a nanofluid past a wedge // Procedia Eng. 2015. Vol. 127. Pp. 1064–1070.
6. Rahman A.M., Alam M.S., Alim M.A., Chowdhury M.K. Unsteady MHD forced convective heat and mass transfer flow along a wedge with variable electric conductivity and thermophoresis // Procedia Eng. 2013. Vol. 56. Pp. 531–537.
7. Yacob N.A., Ishak A., Pop I. Falkner – Skan problem for a static or moving wedge in nanofluids // Int. J. Therm. Sci. 2011. Vol. 50. No. 2. Pp. 133–139.
8. Nagendramma V., Sreelakshmi K., Sarojamma G. MHD heat and mass transfer flow over a stretching wedge with convective boundary condition and thermophoresis // Procedia Eng. 2015. Vol. 127. Pp. 963–969.
9. Kandasamy R., Muhaimin I., Rosmila A.K. The performance evaluation of unsteady MHD non-Darcy nanofluid flow over a porous wedge due to renewable (solar) energy // Renew. Energy. 2014. Vol. 64. Pp. 1–9.
10. Pandey A.K., Kumar M. Effect of viscous dissipation and suction/injection on MHD nanofluid flow over a wedge with porous medium and slip // Alexandria Eng. J. 2016. Vol. 55. No. 4. Pp. 3115–3123.
11. Pandey A.K., Kumar M. Natural convection and thermal radiation influence on nanofluid flow over a stretching cylinder in a porous medium with viscous dissipation // Alexandria Eng. J. 2017. Vol. 56. No. 1. Pp. 55–62.
12. Khanafer K., Vafai K., Lightstone M. Buoyancy-driven heat transfer enhancement in a two-dimensional enclosure utilizing nanofluids // Int. J. Heat Mass Transf. 2003. Vol. 46. No. 19. Pp. 3639–3653.
13. Buongiorno J. Convective transport in nanofluids // ASME J. Heat Transf. 2006. Vol. 128. No. 3. Pp. 240–250.
14. Tiwari R.K., Das M.K. Heat transfer augmentation in two-sided lid-driven differentially heated square cavity utilizing nanofluids // Int. J. Heat Mass Transf. 2007. Vol. 50. No. 9. Pp. 2002–2018.
15. Sheikholeslami M., Abelman S. Two-phase simulation of nanofluid flow and heat transfer in an annulus in the presence of an axial magnetic field // IEEE Trans. Nanot. 2015. Vol. 14. No. 3. Pp. 561–569.
16. Sheikholeslami M., Ganji D.D., Rashidi M.M. Magnetic field effect on unsteady nanofluid flow and heat transfer using Buongiorno model // J. Magn. Magn. Mater. 2016. Vol. 416. Pp. 164–173.
17. Hayat T., Waqas M., Shehzad S.A., Alsaedi A. A model of solar radiation and Joule heating in magnetohydrodynamic (MHD) convective flow of thixotropic nanofluid // J. Mol. Liq. 2016. Vol. 215. Pp. 704–710.
18. Ziaei-Rad M., Saeedan M., Afshari E. Simulation and prediction of MHD dissipative nanofluid flow on a permeable stretching surface using artificial neural network // Appl. Therm. Eng. 2016. Vol. 99. Pp. 373–382.
19. Sheikholeslami M., Hayat T., Alsaedi A. MHD free convection of Al_2O_3 –water nanofluid considering thermal radiation: a numerical study // Int. J. Heat Mass Transf. 2016. Vol. 96. Pp. 513–524.
20. Zhang C., Zheng L., Zhang X., Chen G. MHD flow and radiation heat transfer of nanofluids



in porous media with variable surface heat flux and chemical reaction // *Appl. Math. Modell.* 2015. Vol. 39. No. 1. Pp. 165–181.

21. **Das K., Duari P.R., Kundu P.K.** Numerical simulation of nanofluid flow with convective boundary condition // *J. Egypt. Math. Soc.* 2015. Vol. 23. No. 2. Pp. 435–439.

22. **Pal D., Mandal G.** Hydromagnetic convective-radiative boundary layer flow of nanofluids induced by a nonlinear vertical stretching/shrinking sheet with viscous – Ohmic dissipation // *Powder Technol.* 2015. Vol. 279. Pp. 61–74.

23. **Hayat T., Ashraf M.B., Shehzad S.A., Alsaedi A.** Mixed convection flow of Casson nanofluid over a stretching sheet with convectively heated chemical reaction and heat source/sink // *J. Appl. Fluid Mech.* 2015. Vol. 8. No. 4. Pp. 803–813.

24. **Hayat T., Khan M.I., Waqas M., Yasmeen T., Alsaedi A.** Viscous dissipation effect in flow of magneto-nanofluid with variable properties // *J. Mol. Liq.* 2016. Vol. 222. Pp. 47–54.

25. **Hayat T., Khan M.I., Waqas M., Alsaedi A., Yasmeen T.** Diffusion of chemically reactive species in third grade flow over an exponentially stretching sheet considering magnetic field effects // *Chinese J. Chem. Eng.* 2016. Vol. 25. No. 3. Pp. 257–263.

26. **Upreti H., Pandey A.K., Kumar M.** MHD flow of Ag – water nanofluid over a flat porous plate with viscous – Ohmic dissipation, suction/injection and heat generation/absorption // *Alexandria Eng. J.* 2017. (in press) <https://doi.org/10.1016/j.aej.2017.03.018>.

27. **Hayat T., Shafiq A., Imtiaz M., Alsaedi A.** Impact of melting phenomenon in the Falkner – Skan wedge flow of second grade nanofluid: A revised model // *J. Molec. Liq.* 2016. Vol. 215. Pp. 664–670.

28. **Hayat T., Qayyum S., Imtiaz M., Alsaedi A.** Comparative study of silver and copper water nanofluids with mixed convection and nonlinear thermal radiation // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2016. Vol. 102. Pp. 723–732.

29. **Imtiaz M., Hayat T., Alsaedi A.** Mixed convection flow of Casson nanofluid over a stretching cylinder with convective boundary conditions // *Adv. Powd. Tech.* 2016. Vol. 27. No. 5. Pp. 2245–2256.

30. **Imtiaz M., Hayat T., Alsaedi A.** Flow of magneto nanofluid by a radiative exponentially stretching surface with dissipation effect // *Adv. Powd. Tech.* 2016. Vol. 27. No. 5. Pp. 2214–2222.

31. **Hayat T., Qayyum S., Alsaedi A., Shafiq A.** Inclined magnetic field and heat source/sink aspects in flow of nanofluid with nonlinear thermal radiation // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2016. Vol. 103. Pp. 99–107.

32. **Hayat T., Imtiaz M., Alsaedi A.** Melting heat transfer in the MHD flow of Cu–water nanofluid with viscous dissipation and Joule heating // *Adv. Powd. Tech.* 2016. Vol. 27. No. 4. Pp. 1301–1308.

33. **Sajid M., Javed T., Hayat T.** MHD rotating flow of a viscous fluid over a shrinking surface // *Nonlin. Dyn.* 2008. Vol. 51. No. 1. Pp. 259–265.

34. **Hsiao K.L.** Stagnation electrical MHD nanofluid mixed convection with slip boundary on a stretching sheet // *Appl. Therm. Eng.* 2016. Vol. 98. Pp. 850–861.

35. **Hsiao K.L.** Nanofluid flow with multimedia physical features for conjugate mixed convection and radiation // *Comp. Fluids.* 2014. Vol. 104. Pp. 1–8.

36. **Hsiao K.L.** To promote radiation electrical MHD activation energy thermal extrusion manufacturing system efficiency by using carreau nanofluid with parameters control method // *Energy.* 2017. Vol. 130. Pp. 486–499.

37. **Hsiao K.L.** Micropolar nanofluid flow with MHD and viscous dissipation effects towards a stretching sheet with multimedia feature // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2017. Vol. 112. Pp. 983–990.

38. **Hsiao K.L.** Combined electrical MHD heat transfer thermal extrusion system using Maxwell fluid with radiative and viscous dissipation effects // *Appl. Therm. Eng.* 2017. Vol. 112. Pp. 1281–1288.

39. **Pandey A.K., Kumar M.** Boundary layer flow and heat transfer analysis on Cu–water nanofluid flow over a stretching cylinder with slip // *Alexandria Eng. J.* 2017. (in press) <https://doi.org/10.1016/j.aej.2017.01.017>.

40. **Hayat T., Qayyum S., Alsaedi A., Shehzad S.A.** Nonlinear thermal radiation aspects in stagnation point flow of tangent hyperbolic nanofluid with double diffusive convection // *J. Molec. Liq.* 2016. Vol. 223. Pp. 969–978.

41. **Mustafa M., Hina S., Hayat T., Alsaedi A.** Influence of wall properties on the peristaltic flow of a nanofluid: analytic and numerical solutions // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2012. Vol. 55. No. 17–18. Pp. 4871–4877.

42. **Chaudhary M.A., Merkin J.H.** A simple isothermal model for homogeneous-heterogeneous reactions in boundary-layer flow. I. Equal diffusivities // *Fluid Dyn. Res.* 1995. Vol. 16. No. 6. Pp. 311–333.

43. **Khan M.I., Hayat T., Khan M.I., Alsaedi A.** A modified homogeneous-heterogeneous reactions for MHD stagnation flow with viscous dissipation and Joule heating // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2017. Vol. 113. Pp. 310–317.

44. **Hayat T., Rashid M., Imtiaz M., Alsaedi A.** Nanofluid flow due to rotating disk with variable thickness and homogeneous-heterogeneous reac-

tions // Int. J. Heat Mass Transf. 2017. Vol. 113. Pp. 96–105.

45. **Tanveer A., Hayat T., Alsaedi A., Ahmad B.** Mixed convective peristaltic flow of Sisko fluid in curved channel with homogeneous-heterogeneous reaction effects // J. Molec. Liq. 2017. Vol. 233. Pp. 131–138.

46. **Hayat T., Hussain Z., Alsaedi A., Ahmad B.** Heterogeneous-homogeneous reactions and melting heat transfer effects in flow with carbon nanotubes // J. Molec. Liq. 2016. Vol. 220. Pp. 200–207.

47. **Farooq M., Anjum A., Hayat T., Alsaedi A.** Melting heat transfer in the flow over a variable thicked Riga plate with homogeneous-heterogeneous reactions // J. Molec. Liq. 2016. Vol. 224. Pp. 1341–1347.

Pp. 1341–1347.

48. **Hayat T., Hussain Z., Farooq M., Alsaedi A.** Effects of homogeneous and heterogeneous reactions and melting heat in the viscoelastic fluid flow // J. Molec. Liq. 2016. Vol. 215. Pp. 749–755.

49. **Hayat T., Khan M.I., Farooq M., Yasmeen T., Alsaedi A.** Stagnation point flow with Cattaneo – Christov heat flux and homogeneous-heterogeneous reactions // J. Molec. Liq. 2016. Vol. 220. Pp. 49–55.

50. **Hayat T., Imtiaz M., Alsaedi A., Alzahrani F.** Effects of homogeneous–heterogeneous reactions in flow of magnetite- Fe_3O_4 nanoparticles by a rotating disk // J. Molec. Liq. 2016. Vol. 216. Pp. 845–855.

Статья поступила в редакцию 09.03.2017, принята к публикации 10.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАНДИ Алок Кумар — сотрудник кафедры математики Индийского технологического института Рурки, г. Рурки, Индия.

8th km Dehradun Road, Puhana, Roorkee, Uttarakhand 247667, India
mr.alokpandey1@gmail.com

КУМАР Манодж — сотрудник Колледжа фундаментальных и гуманитарных наук Университета сельского хозяйства и технологии им. Говинда Балабаха Панта, г. Пантнагар, Индия.

District Udham Singh Nagar, Pantnagar, Uttarakhand 263153, India
mnj_kumar2004@yahoo.com

DOI: 10.18721/JPM.10405

УДК 620.179.152.5

ЭМИССИОННАЯ ГАММА-ТОМОГРАФИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ТЕПЛОВЫДЕЛЯЮЩЕЙ СБОРКИ РЕАКТОРА БОР-60

**В.А. Жителев, Е.А. Звир, М.В. Куприенко,
А.В. Строжук, Г.Д. Нуруллина**

Государственный научный центр – научно-исследовательский институт атомных реакторов,
г. Дмитровград, Ульяновская область, Российская Федерация

В материаловедческом комплексе АО «ГНЦ НИИАР» была проведена компьютерная эмиссионная гамма-томография негерметичной экспериментальной тепловыделяющей сборки (ЭТВС) с использованием гамма-спектрометрического оборудования и установки 2D-позиционирования (размещена в защитной камере), испытанной в исследовательском реакторе БОР-60. В статье приводится описание оборудования использованной установки гамма-томографии, итерационного алгебраического алгоритма, созданного специально для обработки проекционных данных, а также результатов восстановления в сечении ЭТВС картин распределения радиоактивных продуктов деления ядерного топлива и активации конструкционных материалов. Результаты реконструкции показали, что в исследованном сечении ЭТВС произошло расплавление топлива ТВЭЛов и части внутренней обоймы с образованием кориума. Проведенное исследование доказало эффективность использованного метода и работоспособность разработанного алгоритма реконструкции.

Ключевые слова: эмиссионная компьютерная гамма-томография; итерационный алгебраический алгоритм реконструкции; тепловыделяющая сборка

Ссылка при цитировании: Жителев В.А., Звир Е.А., Куприенко М.В., Строжук А.В., Нуруллина Г.Д. Эмиссионная гамма-томография экспериментальной тепловыделяющей сборки реактора БОР-60 // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 73–81. DOI: 10.18721/JPM.10405

EMISSION GAMMA TOMOGRAPHY OF THE TEST FUEL ASSEMBLY FOR BOR-60 REACTOR

V.A. Zhitelev, E.A. Zvir, M.V. Kuprienko, A.V. Strozhek, G.D. Nurullina

State Scientific Center – Research Institute of Atomic Reactors,
Dimitrovgrad, Russian Federation

Computerized emission gamma tomography of the test leaky fuel assembly irradiated in the research reactor BOR-60 has been carried out at the Material test department of Joint-Stock Company JSC «SSC RIAR» using gamma spectrometry equipment and installation for 2D-positioning placed in a hot cell. The paper describes the gamma tomography installation, reconstruction algebraic iteration scheme used for data processing and the results of reconstruction of fission products of nuclear

fuel and products of activation of constructional materials distribution in the cross-section of the fuel assembly. The reconstruction results showed that the meltdown of the power rods' fuel and of the internal casing's part with corium formation had occurred in the investigated cross-section of the fuel assembly. The conducted research proved the effectiveness of the used technique and the serviceability of the developed reconstruction algorithm.

Key words: emission computer gamma tomography; reconstruction algebraic iteration scheme; test fuel assembly

Citation: V.A. Zhitelev, E.A. Zvir, M.V. Kuprienko, A.V. Strozhek, G.D. Nurullina, Emission gamma tomography of the test fuel assembly for BOR-60 reactor, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 73–81. DOI: 10.18721/JPM.10405

Введение

Компьютерная томография является одним из эффективных методов контроля, позволяющего получать изображение внутреннего строения объекта без его разрушения. По способу получения информации томографические методы, как известно, делятся на трансмиссионные и эмиссионные. В трансмиссионной компьютерной томографии информацию об объекте получают путем его просвечивания потоком излучения от внешнего источника. При этом измеряется поток, прошедший через объект, а результатом обработки данных является распределение линейного коэффициента ослабления излучения в сечении объекта. Эмиссионная томография базируется на регистрации собственного излучения объекта и решает задачу восстановления в его сечении распределения коэффициента эмиссии.

Применение компьютерной гамма-томографии при выполнении послереакторных исследований отработавших тепловыделяющих сборок и элементов (ТВС и ТВЭЛ, соответственно) позволяет отказаться от дорогостоящих разрушающих исследований, уменьшить количество образующихся радиоактивных отходов и снизить дозовую нагрузку на персонал. Использование для регистрации гамма-излучения полупроводниковых детекторов с высоким энергетическим разрешением дает возможность получить в сечении исследуемого объекта не только распределение плотности материалов, но и распределение радионуклидов — продуктов деления ядерного топлива и активации конструкционных материалов [1 – 7]. Особенно эффективно

методы компьютерной гамма-томографии применяются для идентификации негерметичных ТВЭЛов в дефектных ТВС [8, 9].

В материаловедческом комплексе акционерного общества «Государственный научный центр — научно-исследовательский институт атомных реакторов» (АО «ГНЦ НИИАР») была проведена малоракурсная эмиссионная гамма-томография негерметичной экспериментальной тепловыделяющей сборки (ЭТВС), испытанной в реакторе BOR-60. С этой целью было использовано гамма-спектрометрическое оборудование и установка **2D-позиционирования**, размещенная в защитной камере.

В данной статье приводится описание оборудования в установке гамма-томографии, алгоритма, использованного для обработки проекционных данных, а также результаты восстановления картин распределения топлива и конструкционных материалов в сечении ЭТВС.

Описание ЭТВС и оборудования в установке гамма-томографии

Исследуемая ЭТВС (рис. 1) была укомплектована семью ТВЭЛами *1*, расположенными внутри фигурной обоймы *2* и внутренней трубы *3* (последние выполнены из стали 12Х18Н10Т).

Шестигранный чехол *4* и оболочки ТВЭЛов изготовлены из хромистых сталей ферритно-мартенситного класса ЭП450 и ЧС139, соответственно. Внутри ТВЭЛов расположен столб таблеток ядерного топлива высотой 400 мм. Снизу и сверху столба топлива расположены торцевые экраны из таблеток высотой 80 и 60 мм, соответственно. ЭТВС облучалась в реакторе BOR-60 до

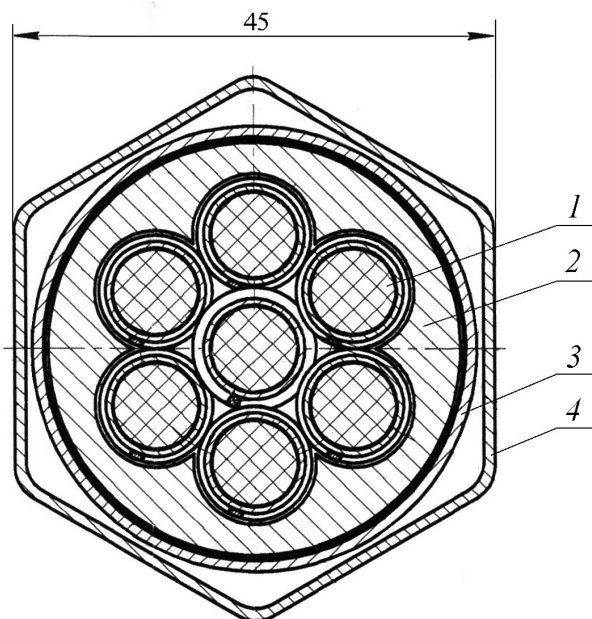


Рис. 1. Расположение деталей экспериментальной тепловыделяющей сборки (ЭТВС) в ее поперечном сечении:
1 – ТВЭЛ, 2 – фигурная обойма, 3 – внутренняя труба, 4 – чехол

выгорания топлива B , которое измеряется в процентах разделившихся тяжелых атомов:

$$B = (0,72 \pm 0,03) \% \text{ тяж. ат.}$$

По результатам контроля герметичности оболочек ТВЭЛов ЭТВС была выгружена из реактора как негерметичная.

Оборудование установки гамма-томографии состоит из механизма 2D-позиционирования, смонтированного в защитной камере, измерительно-управляющей системы, расположенной в операторском помещении, и коллимационной системы (поз. 2 на рис. 2).

Механизм 2D-позиционирования (рис. 2) представляет собой массивную станину, на которой располагаются механизмы горизонтального (4) и вертикального (1) позиционирования с шаговыми двигателями, и ложемент 3 для размещения исследуемых изделий. Для горизонтального позиционирования используется шариковая пара, для вертикального – червячно-реечный механизм. Конструкция ложемента позволяет менять угловую ори-

ентацию изделия (поворачивать вокруг своей оси) с шагом 30° .

Измерительно-управляющая система построена на основе спектрометрического устройства DSPEC jr 2.0 компании «Ortec» [10] с германиевым детектором гамма-излучения GEM10P4-70-PL и на базе программируемого контроллера управления шаговыми двигателями компании «Phytron-Elektronik GmbH». При наборе проекционных данных (сканировании изделия) система в автоматическом режиме выполняет позиционирование изделия относительно оптической оси коллиматора, набор спектра гамма-излучения, определение площади пиков полного поглощения (ППП) для заданных радионуклидов и запись результатов на жесткий диск.

Сканирование поперечного сечения ЭТВС и обработка проекционных данных

Указанное сканирование проводилось в поперечном сечении на дефектном участке ЭТВС, где по результатам рентгеновской

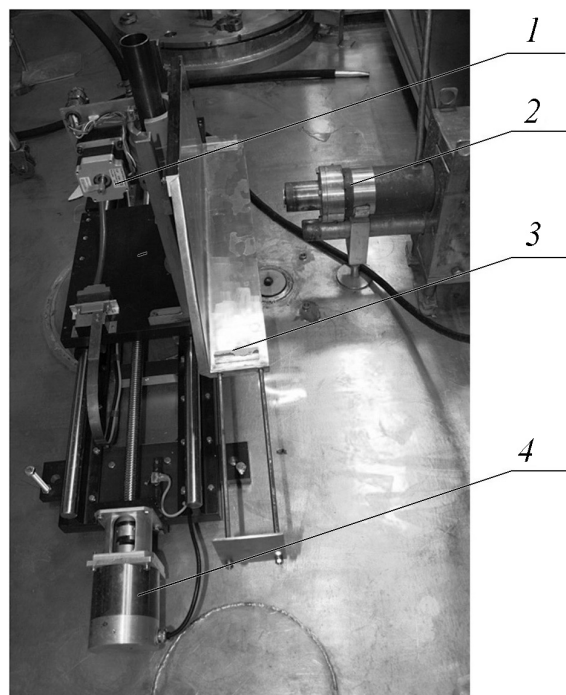


Рис. 2. Внешний вид механизма 2D-позиционирования в защитной камере:

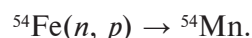
1, 4 – шаговые двигатели вертикального и горизонтального перемещений, соответственно; 2 – коллимационная система; 3 – ложемент

радиографии и осевого гамма-сканирования было выявлено нарушение целостности конструкции. Для восстановления внутренней структуры ЭТВС использовались результаты регистрации ППП следующих радионуклидов, являющихся продуктами деления ядерного топлива и активации конструкционных материалов [11]:

1) ^{95}Nb (765,8 кэВ, период полураспада – 35 дней). Относится к нелетучим продуктам деления, не образует металлических фаз, находится в твердом растворе

в кристаллической решетке керамического топлива и, таким образом, в наилучшей степени отвечает требованиям индикатора наличия топлива;

2) ^{54}Mn (834,9 кэВ, период полураспада – 312 дней). Образуется по реакции



Этот изотоп содержится во всех элементах стальных конструкций после облучения в реакторе (чехол, фигурная обойма, внутренняя труба, оболочки ТВЭЛОВ);

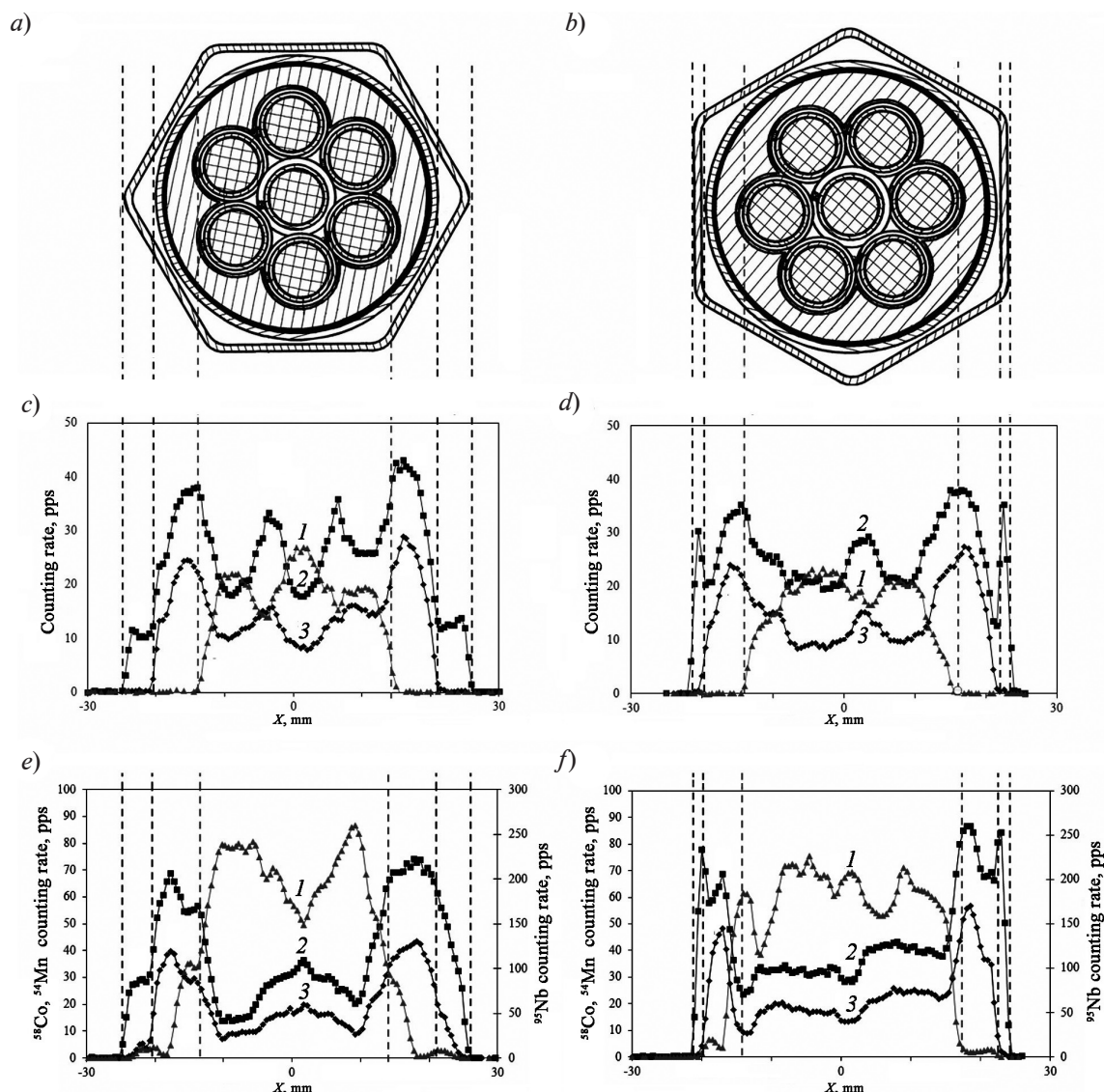
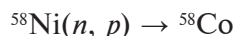


Рис. 3. Две угловые ориентации ЭТВС (a,b) и соответствующие распределения (c – f) скорости счета радионуклидов ^{95}Nb (1), ^{54}Mn (2), ^{58}Co (3) вдоль координаты X при угловых ориентациях 0° (a, c, e) и 90° (b, d, f) на бездефектном (c, d) и дефектном (e, f) участках

3) ^{58}Co (810,8 кэВ, период полураспада — 71 день). Образуется по реакции



и содержится в элементах конструкции из хромо-никелевой стали 12Х18Н10Т (фигурная обойма, труба). Однако он практически отсутствует в оболочках ТВЭЛОВ и шестигранном чехле ЭТВС, изготовленных из ферритно-мартенситных сталей.

Распределения скорости счета радионуклидов ^{95}Nb , ^{54}Mn , ^{58}Co вдоль координаты X , полученные при сканировании ЭТВС в двух угловых ориентациях (0 и 90°) на дефектном и бездефектном (в нижней части ТВЭЛОВ, в месте расположения нижнего торцевого экрана) участках, приведены в качестве примера на рис. 3.

На бездефектном участке распределение всех радионуклидов вдоль линии сканирования соответствует проектному расположению ТВЭЛОВ и конструктивных элементов в поперечном сечении ЭТВС. На дефектном участке нет такого соответствия, профиль распределения скорости счета по всем радионуклидам изменился, наблюдается расширение границ области, занятой топливом. Все эти факты свидетельствуют о нарушении целостности конструкции и массопереносе топлива в этом сечении.

Сканирование ЭТВС на дефектном участке выполнялось с шагом 0,5 мм по координате X в двенадцати угловых ориентациях. Использовался коллиматор со следующими размерами отверстия: 0,5 мм вдоль линии сканирования и 20 мм вдоль оси ЭТВС. Длина оптической оси (расстояние между детектором и изделием) составила примерно 2,5 м.

Реконструкция распределений радионуклидов ^{95}Nb , ^{54}Mn , ^{58}Co по сечению ЭТВС проводилась с использованием алгебраических методов [12, 13], в основе которых лежит дискретизация (разбиение) области, в которой задан исследуемый объект, на конечное число подобластей (ячеек). В пределах одной подобласти интенсивность гамма-излучения радионуклидов и линейный коэффициент ослабления излучения считаются постоянными (рис. 4).

Проецируемый оператор, переводящий дискретизированную искомую функцию в набор проекционных данных (значения скорости счета, измеренные детектором), в этом случае будет иметь вид

$$f_j = \sum_{i=1}^n g_i s_i^j \exp(-\lambda_i l_i^j), \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (1)$$

где f_j — значение скорости счета, измеренное детектором; g_i — интенсивность

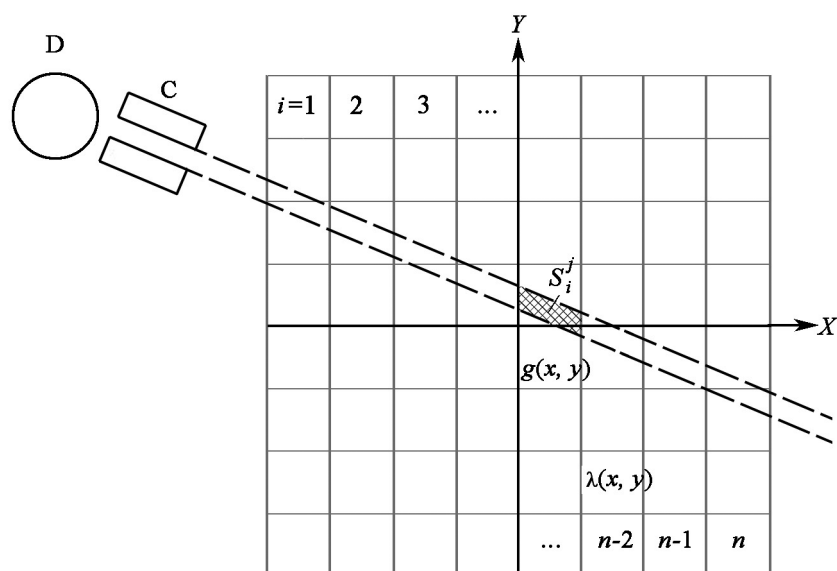


Рис. 4. Схема дискретизации объекта (см. обозначения величин к формуле (1));
D — детектор, C — коллиматор

гамма-излучения i -ой ячейки; s_i^j — площадь i -ой ячейки (выражается в относительных единицах), отсекаемая границами полосы проецирования для j -го измерения; λ_i — линейный коэффициент ослабления гамма-излучения (принимался постоянным по всему сечению исследуемого объекта); l_i^j — длина пути, пройденного гамма-излучением от i -ой ячейки до границы объекта в направлении детектора для j -го измерения; i — номер ячейки; j — номер измерения.

Уравнение (1) можно переписать в виде

$$f_j = \sum_{i=1}^N g_i h_i^j, \quad (2)$$

где $h_i^j = s_i^j \exp(-\lambda_i l_i^j)$ — вычисляемый параметр.

При размере ячейки 1 мм их общее количество n равно 2500 (сетка 50×50). При сканировании по координате X с шагом 0,5 мм (количество точек в одной проекции равно 106) общее количество измерений m составит 1272 для двенадцати угловых ориентаций.

Наличие априорной информации о наружных габаритах чехла ЭТВС, содержащейся в измерениях скорости счета радионуклида ^{54}Mn , позволило уменьшить размерность системы n до 1666. Ячейки, для которых выполнялись соотношения

$$f_j < \delta, s_i^j > 0, r_i > r_{\max}, \quad (3)$$

исключались из обработки, а интенсивность их гамма-излучения g_i и линейный коэффициент ослабления λ_i приравнялись к нулю.

В соотношениях (3) δ — уровень фона внутри защитной камеры по определенному радионуклиду; r_i — радиус i -ой ячейки (расстояние от центра ячейки до центра матрицы); $r_{\max}$ — радиус окружности, охватывающий границы сечения ЭТВС.

Задача реконструкции состоит в решении системы m линейных уравнений (2) с n неизвестными g_i . Для решения был использован итерационный алгебраический алгоритм следующего вида:

$$g_i^{(k+1)} = g_i^{(k)} + \frac{h_i^j}{\sum_{i=1}^n (h_i^j)^2} \left(f_j - \sum_{i=1}^N g_i h_i^j \right), \quad (4)$$

где k — номер итерации.

Программа для обработки была написана на алгоритмическом языке Фортран-95. Плотная упаковка конструктивных элементов в поперечном сечении ЭТВС (отсутствие больших воздушных карманов) позволила использовать только одно значение линейного коэффициента ослабления ($0,08 \text{ мм}^{-1}$) для всех обрабатываемых ячеек. Варьирование значения λ_i в пределах $0,05 - 0,10 \text{ мм}^{-1}$, изменяющего абсолютные значения g_i , не дало существенного изменения относительного распределения радионуклидов по сечению ЭТВС.

Результаты реконструкции карт распределения радионуклидов ^{95}Nb , ^{54}Mn , ^{58}Co по сечению ЭТВС приведены на рис. 5. По результатам анализа этих карт можно сделать вывод о том, что в исследованном сечении ЭТВС произошло расплавление топлива ТВЭЛов и части фигурной обой-

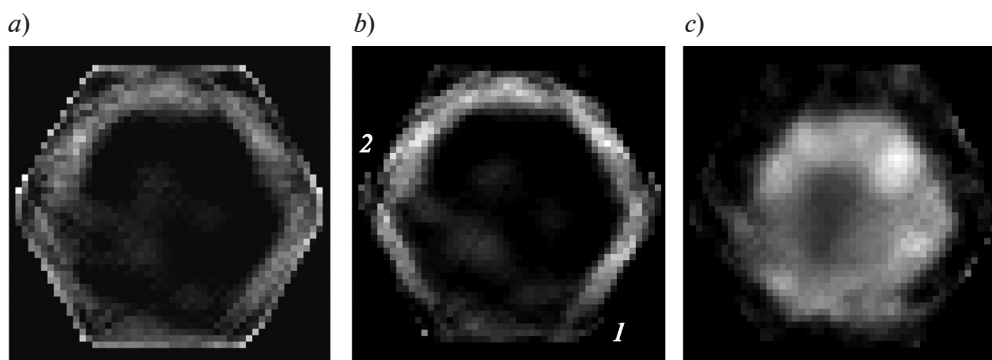


Рис. 5. Результаты реконструкции карт распределения радионуклидов ^{54}Mn (a), ^{58}Co (b), ^{95}Nb (c) по сечению ЭТВС; 1, 2 — точки сечения



мы с образованием кориума. В точках 1 и 2 сечения (см. рис. 5, *b*) топливо проплавало стенки обоймы и вошло в контакт с чехлом ЭТВС. Геометрия чехла при этом не была нарушена. Вскрытие чехла, отбор и анализ вещества, обнаруженного в зазоре между внутренней трубой и внутренней поверхностью чехла, подтвердили перемещение топлива в поперечном сечении ЭТВС и его взаимодействия с материалами элементов конструкции.

Заключение

В материаловедческом комплексе АО «ГНЦ НИИАР» была проведена малоракурсная эмиссионная гамма-томография негерметичной экспериментальной тепловыделяющей сборки, испытанной в реакторе БОР-60. При этом использовались

гамма-спектрометрическое оборудование и установка 2D-позиционирования, размещенная в защитной камере. В сечении ЭТВС была выполнена реконструкция распределений скорости счета радионуклидов ^{95}Nb , ^{54}Mn , ^{58}Co , являющихся продуктами деления ядерного топлива и продуктами активации конструкционных материалов. Данная реконструкция осуществлена с помощью алгебраического итерационного алгоритма. Ее результаты показали, что в исследованном сечении ЭТВС произошло расплавление топлива ТВЭЛов и части фигурной обоймы с образованием кориума.

Проведенное исследование доказало эффективность использованного метода и работоспособность разработанного алгоритма реконструкции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Industrial process gamma tomography// Vienna: IAEA, 2008. IAEA-TECDOC-1589. Pp. 38–54.
2. **Holcombe S.** Gamma spectroscopy and gamma emission tomography for fuel performance characterization of irradiated nuclear fuel assemblies // Digital Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Science and Technology 1201. 2014. 94 p. Uppsala: Acta Universitatis Upsaliensis. ISBN 978-91-554-9099-7, URL: <https://uu.diva-portal.org/smash/get/diva2:759071/FULLTEXT01.pdf>.
3. **Koivuranta S.** Gamma spectrometry and gamma and X-ray tomography of nuclear fuel. Lappeenranta: Lappeenranta University of Technology. Faculty of Technology. Energy Technology. Master's thesis. 2009. 81 p. URL: <http://www.doria.fi/bitstream/handle/10024/45052/nbnfi-fe200905131446.pdf;sequence=3>.
4. **Jansson P.** Studies of nuclear fuel by means of nuclear spectroscopic methods // Acta Universitatis Upsaliensis. Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Science and Technology. 714. 2002. 81 p. Uppsala. URL: https://www.kth.se/polopoly_fs/1.468919!/Studies%20of%20Nuclear%20Fuel%20by%20Means%20of%20Nuclear%20Spectroscopic%20Methods.pdf.
5. **Caruso S., Murphy M.F., Jatuff F., Chawla R.** Nondestructive determination of fresh and spent nuclear fuel rod density distributions through computerized gamma-ray transmission tomography // Journal of Nuclear Science and Technology. 2008. Vol. 45. No. 8. Pp. 828–835.
6. **Косарев Л.И., Кузелев Н.Р., Штань А.С., Юмашев В.М., Дворецкий В.Г., Жителев В.А.** Опыт применения методов и аппаратуры радиационной интроскопии и томографии при отработке технологии изготовления топливных элементов АЭС // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2006. Т. 72. № 1. С. 32–35.
7. **Zhitelev V.A., Dvoretzky V.G., Komarov V.P., et al.** Performance of emission tomography of cylindrical fuel rods by the use of algorithms of approximation of radionuclide activity distribution in harmonic series // Advanced Post-Irradiation Examination Techniques for Water Reactor Fuel. IAEA, Vienna, 2002. IAEA-TECDOC-1277, Pp. 91–104.
8. **Holcombe S., Svärd S.J., Eitheim K., Hallstudius L., Willmann Ch.** Feasibility of identifying leaking fuel rods using gamma tomography//Annals of Nuclear Energy. 2013. Vol. 57. Pp. 334–340.
9. **Svärd S.J., White-2 T.A., Smith-2 L.E., et al.** Gamma-ray emission tomography: modelling and evaluation of partial-defect testing capabilities // Symposium on International Safeguards “Linking Strategy. Implementation and People. IAEA CN-220”, 20–24 October 2014, Vienna, Austria, URL: <https://www.iaea.org/safeguards/symposium/2014/home/eproceedings/sg2014-papers/000223.pdf>
10. Веб-сайт компании ORTEC, DSPEC jr 2.0 Digital Signal Processing Gamma Ray Spectrometer. URL: <http://www.ortec-online.com/products/electronics/multichannel-analyzers-mca/>

workstation/dspec-jr-20.

11. Nuclear data library of fission products. 2nd version. Ed. M. Yoshikawa. Japanese Nuclear Data Committee. Japan Atomic Energy Research Institute, 1990. 253 p. [http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/22/045/](http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/22/045/22045674.pdf)

22045674.pdf

12. **Хермен Г.** Восстановление изображений по проекциям. Основы реконструктивной томографии. Пер. с англ. М.: Мир, 1983. 352 с.

13. **Терещенко С.А.** Методы вычислительной томографии. М.: Физматлит, 2004. 320 с.

Статья поступила в редакцию 06.07.2017, принята к публикации 18.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЖИТЕЛЕВ Владимир Алексеевич — кандидат технических наук, начальник департамента отделения реакторного материаловедения Акционерного общества «Государственный научный центр — научно-исследовательский институт атомных реакторов» (АО «ГНЦ НИИАР»), г. Димитровград, Российская Федерация.

433510, Российская Федерация, Ульяновская область, г. Димитровград, Западное шоссе, 9
vaj1952@gmail.com

ЗВИР Елена Аркадьевна — кандидат технических наук, начальник отделения реакторного материаловедения АО «ГНЦ НИИАР», г. Димитровград, Российская Федерация.

433510, Российская Федерация, Ульяновская область, г. Димитровград, Западное шоссе, 9
ea-zvir@niiar.ru

КУПРИЕНКО Максим Викторович — начальник группы отделения реакторного материаловедения АО «ГНЦ НИИАР», г. Димитровград, Российская Федерация.

433510, Российская Федерация, Ульяновская область, г. Димитровград, Западное шоссе, 9
irakupr64@rambler.ru

СТРОЖУК Андрей Владиславович — начальник лаборатории отделения реакторного материаловедения АО «ГНЦ НИИАР», г. Димитровград, Российская Федерация.

433510, Российская Федерация, Ульяновская область, г. Димитровград, Западное шоссе, 9
strozhuk@yandex.ru

НУРУЛЛИНА Гульшан Давроновна — младший научный сотрудник отделения реакторного материаловедения АО «ГНЦ НИИАР», г. Димитровград, Российская Федерация.

433510, Российская Федерация, Ульяновская область, г. Димитровград, Западное шоссе, 9
ngulshan@yandex.ru

REFERENCES

[1] Industrial Process Gamma Tomography, IAEA, Vienna, 2008. IAEA-TECDOC-1589, (2008) 38–54.

[2] **S. Holcombe**, Gamma spectroscopy and gamma emission tomography for fuel performance characterization of irradiated nuclear fuel assemblies, Digital Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Science and Technology 1201, (2014) Uppsala, Acta Universitatis Upsaliensis, ISBN 978-91-554-9099-7, URL: <https://uu.diva-portal.org/smash/get/diva2:759071/FULLTEXT01.pdf>.

[3] **S. Koivuranta**, Gamma spectrometry and gamma and X-ray tomography of nuclear fuel, Lappeenranta University of Technology, Faculty of Technology, Energy Technology, Master's thesis, (2009) URL: <http://www.doria.fi/bitstream/>

handle/10024/45052/nbnfi-fe200905131446.pdf;sequence=3.

[4] **P. Jansson**, Studies of nuclear fuel by means of nuclear spectroscopic methods, Acta Universitatis Upsaliensis, Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Science and Technology 714 (2002) Uppsala. ISBN 91-554-5215-5, URL: https://www.kth.se/polopoly_fs/1.468919!/Studies%20of%20Nuclear%20Fuel%20by%20Means%20of%20Nuclear%20Spectroscopic%20Methods.pdf.

[5] **S. Caruso, M.F. Murphy, F. Jatuff, R. Chawla**, Nondestructive determination of fresh and spent nuclear fuel rod density distributions through computerized gamma-ray transmission tomography, Journal of Nuclear Science and Technology. 45 (8) (2008) 828–835.



[6] L.I. Kosarev, N.R. Kuzelev, A.S. Shtan, et al., Opyt primeneniya metodov i apparatury radiatsionnoy introskopii i tomografii pri otrabotke tekhnologii izgotovleniya toplivnykh elementov AES [Case record of methods and radiation introscopy and tomography facilities when elaborating the technology of making NPP fuel cells], Industrial Laboratory. Materials Diagnostics. 72 (1) (2006) 32–35.

[7] V.A. Zhitelev, V.G. Dvoretzky, V.P. Komarov, et al., Performance of emission tomography of cylindrical fuel rods by the use of algorithms of approximation of radionuclide activity distribution in harmonic series, Advanced Post-Irradiation Examination Techniques for Water Reactor Fuel. IAEA, Vienna, 2002. IAEA-TECDOC-1277, (2002) 91–104.

[8] S. Holcombe, S.J. Svärd, K. Eitrheim, et al., Feasibility of identifying leaking fuel rods using gamma tomography, Annals of Nuclear Energy. 57 (2013) 334–340.

[9] S.J. Svärd-1, T.A. White-2, L.E. Smith-2, et al., Gamma-ray emission tomography: modelling and evaluation of partial-defect testing capabilities,

Symposium on International Safeguards “Linking Strategy, Implementation and People- IAEA CN-220”, 20–24 October 2014, Vienna, Austria, URL: <https://www.iaea.org/safeguards/symposium/2014/home/eproceedings/sg2014-papers/000223.pdf>

[10] Web site of the ORTEC company, DSPEC jr 2.0 Digital Signal Processing Gamma Ray Spectrometer, URL: <http://www.ortec-online.com/products/electronics/multichannel-analyzers-mca/workstation/dspec-jr-20>.

[11] Nuclear data library of fission products, 2nd version, Ed. M. Yoshikawa, Japanese Nuclear Data Committee, Japan Atomic Energy Research Institute, 1990.

http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/22/045/22045674.pdf

[12] G.T. Herman, Image reconstruction from projection. The fundamentals of computerized tomography, Springer, 2012.

[13] S.A. Tereshchenko, Metody vychislitelnoy tomografii [Methods of computerized tomography]. Moscow, Fizmatlit, 2004.

Received 06.07.2017, accepted 18.10.2017.

THE AUTHORS

ZHITELEV Vladimir A.

Joint stock company «State scientific center research institute of atomic reactors»

9, Zapadnoye Hwy, Ulyanovsk region, Dimitrovgrad, 433510, Russian Federation
vaj1952@gmail.com

ZVIR Elena A.

Joint stock company «State scientific center research institute of atomic reactors»

9, Zapadnoye Hwy, Ulyanovsk region, Dimitrovgrad, 433510, Russian Federation
ea-zvir@niiar.ru

KUPRIENKO Maxim V.

Joint stock company «State scientific center research institute of atomic reactors»

9, Zapadnoye Hwy, Ulyanovsk region, Dimitrovgrad, 433510, Russian Federation
irakupr64@rambler.ru

STROZHUK Andrey V.

Joint stock company «State scientific center research institute of atomic reactors»

9, Zapadnoye Hwy, Ulyanovsk region, Dimitrovgrad, 433510, Russian Federation
strozhuk@yandex.ru

NURULLINA Gulshan D.

Joint stock company «State scientific center research institute of atomic reactors»

9, Zapadnoye Hwy, Ulyanovsk region, Dimitrovgrad, 433510, Russian Federation
ngulshan@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.10406

УДК 621.373.826

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГАРМОНИЧЕСКИХ СОСТАВЛЯЮЩИХ ШУМА НА ФОНЕ ДРУГИХ ВИДОВ ШУМА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**А.И. Бодров, В.С. Зоркин,
Е.Г. Чуляева, А.Я. Паюров, В.В. Кюн**

АО «Плазма»,
г. Рязань, Российская Федерация

Исследованы причины ограничения и снижения стабильности характеристик источников когерентного оптического излучения. С помощью установок для измерения нестабильности частоты и мощности лазерного излучения были получены экспериментальные данные, анализ которых выявил существенное влияние шумов лазерного излучения на стабильность его параметров. Эти шумы были изучены с использованием автокорреляционной функции и дисперсии Аллана. При этом удалось классифицировать шумы и тем самым установить пути повышения качества изготовления лазеров. Проведенные исследования позволили детерминировать причины снижения рабочих характеристик лазеров, не выходя за пределы приемо-сдаточных и периодических испытаний.

Ключевые слова: шум; частотно-стабилизированный лазер; дисперсия Аллана; автокорреляционная функция; нестабильность частоты

Ссылка при цитировании: Бодров А.И., Зоркин В.С., Чуляева Е.Г., Паюров А.Я., Кюн В.В. Определение гармонических составляющих шума на фоне других видов шума лазерного излучения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 82–91. DOI: 10.18721/JPM.10406

DETERMINATION OF HARMONIC NOISE COMPONENTS AGAINST THE BACKGROUND OF OTHER TYPES OF LASER NOISE

**A.I. Bodrov, V.S. Zorkin,
E.G. Chulyaeva, A.Ya. Payurov, V.V. Kyun**

Joint-stock company "Plasma",
Ryazan, Russian Federation

The reasons for limitation and degradation of consistency of performance of coherent optical emission sources have been investigated. The experimental data were obtained using measuring assembly for frequency and power laser-emission instability. The data treatment revealed the significant influence of laser-radiation noise on its parameter stability. The noise was examined by application of an autocorrelation function and the Allan variance. This technique made possible to classify the noise under types; these were flicker, interference noise and the one caused by the directivity-axis position instability. By doing so, this provided to ascertain the ways for quality improvement of laser production. The conducted studies allowed determination of the reasons for degradation of consistency of the laser performance without coming outside the limits of acceptance and periodical tests.

Key words: noise; frequency stabilized laser; Allan variance; autocorrelation function; power instability

Citation: A.I. Bodrov, V.S. Zorkin, E.G. Chulyaeva, A.Ya. Payurov, V.V. Kyun, Determination of harmonic noise components against the background of other types of laser noise, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 82–91. DOI: 10.18721/JPM.10406



Введение

Стабильность частоты лазерного излучения и воспроизводимость значения этой частоты были предметами исследования в течение более чем тридцати лет, тем не менее, интерес к этой проблеме не ослабевает. Так, в стандартах частоты стабилизация частоты осуществляется по реперным точкам спектрального резонанса и по реперной точке его вершины [1].

Метод нахождения предельной стабильности частоты в данной работе выражен среднеквадратичным двухвыборочным отклонением, т. е. девиацией Аллана, и определяется соотношением

$$\frac{\sigma(2, \tau_0)}{\bar{\nu}} = \frac{1}{\bar{\nu}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\nu_{i+1}^{-\tau_0} - \nu_i^{-\tau_0}}{2} \right)^2} \geq \frac{\gamma}{\nu \mu} \sqrt{\tau_0}, \quad (1)$$

где τ_0 — время усреднения; N — общее количество пар отсчетов; $\bar{\nu}$ — среднее и текущее значения несущей частоты; γ — ширина реперной линии; μ — отношение сигнал/шум.

Наиболее распространенные методы измерения параметров лазерного излучения включают в себя, в частности, измерение пространственных и энергетических характеристик пучка. Для измерения таких характеристик разработаны автоматизированные устройства, например установки, описанные в работах [2, 3]. Определение характеристик частотно-стабилизированных лазеров требует разработки ряда специальных установок и методик измерения.

Для обеспечения необходимой точности современных измерений налагаются высокие требования на стабильность характеристик источников когерентного излучения. Ввиду этого, являются актуальными исследования причин ограничения и снижения стабильности характеристик данных источников.

Цели настоящей работы — анализ типов шума в излучении стабилизированных лазеров и выявление причин их возникновения.

Наличие периодических составляющих в спектре шума лазерной эмиссии приводит к снижению стабильности характеристик лазера, вплоть до выхода прибора из строя.

Методическая часть

В настоящей работе анализ непериодических составляющих шума проведен по методу Аллана [4, 5]. Поскольку анализ шумов производился во временной области, наиболее результативным оказалось использование вариации Аллана: $\sigma_y^2(\tau_0)$, или ВА (обозначение Национального института стандартов и технологий), а также квадратного корня из вариации Аллана.

Эти характеристики позволяют определять наличие фликкер-шума, белого шума и варианты этих видов шума. Например, если построить зависимость вариации Аллана от времени усреднения измерительной аппаратуры, то эти виды шума можно различить. Однако использование указанного метода не позволяет различать гармонические составляющие в спектре лазерных шумов. Эти составляющие можно детерминировать лишь путем построения автокорреляционной функции.

Рассмотрим спектр лазерного излучения, содержащий гармоническую составляющую [6], спектральная плотность которого следует выражению:

$$S_x(f) = \frac{x^2}{2} \delta(f - f_0), \quad (2)$$

где $\delta(f - f_0)$ — дельта-функция; f_0 — частота гармонического сигнала; f — циклическая возмущающая частота; x — амплитуда гармонического сигнала.

Спектр содержит две гармоники вида

$$F(f) = 0,5x\delta(f - f_0)e^{j\varphi} + 0,5x\delta(f - f_0)e^{-j\varphi}$$

на частотах f_0 и $-f_0$ соответственно.

Мы рассматриваем только первую составляющую из двух приведенных.

Автокорреляционная функция может быть выражена следующим образом [7]:

$$k_y(\tau) = \frac{2x^2 \sin^2\left(\frac{f_0\tau}{2}\right)}{f_0^2\tau^2} \cos f_0\tau, \quad (3)$$

где τ — лаг.

В рассматриваемом случае автокорреляционная функция гармонического сигнала также представляет собой периодическую функцию с периодом входного сигнала, ам-

плитуда которого равна половине квадрата амплитуды выходного сигнала. Автокорреляционная функция не зависит от фазового сдвига входного сигнала.

В настоящей работе выявление шумов лазерного излучения производилось в рамках проведения измерений характеристик, наиболее важных для стабилизированных лазеров; это нестабильность оптической частоты и нестабильность мощности лазерного излучения [8].

Методика измерения нестабильности оптической частоты [9]. Поскольку для частотно-стабилизированных лазеров основная характеристика — стабильность оптической частоты, при выпуске лазеров производится измерение длины волны и нестабильности частоты на каждом выпускаемом приборе. При этом используется специальное оборудование для измерения нестабильности частоты и длины волны промышленно-выпускаемых частотно-стабилизированных лазеров. Структурная схема данной установки приведена на рис. 1.

Измерения осуществляются во временной области и заключаются в определении частоты биений между исследуемым и опорным лазерами с помощью частотомера и устройства автоматической регистрации сигнала биений. Полученные в результате измерений данные анализируются и статисти-

чески обрабатываются. В качестве эталонного в данной установке используется гелий-неоновый лазер, стабилизированный по частоте насыщенного поглощения в йодной ячейке. Стабилизация частоты опорного лазера осуществляется по частоте третьей гармоники сигнала модуляции излучения. Выходное управляющее напряжение системы стабилизации опорного лазера, полученное в результате преобразования сигнала ошибки, поступает на пьезокорректор, на котором установлено одно из зеркал резонатора гелий-неонового лазера с йодной ячейкой (He-Ne/I_2). В режиме сканирования на осциллографе наблюдаются все пики лазерного излучения от A до N по четыре группы пиков. Каждому пику поглощения йодной ячейки соответствует аттестованное значение длины волны лазерного излучения. Аттестация опорного лазера производится в международных организациях путем сравнения с эталонными аналогичными йодными лазерами.

Стабилизация частоты лазера He-Ne/I_2 осуществляется по пику, частота которого имеет наиболее близкое значение к частоте излучения испытываемого лазера.

Относительную нестабильность частоты определяют за время измерения t при времени усреднения τ_0 . В зависимости от величины параметров t и τ_0 , нестабиль-

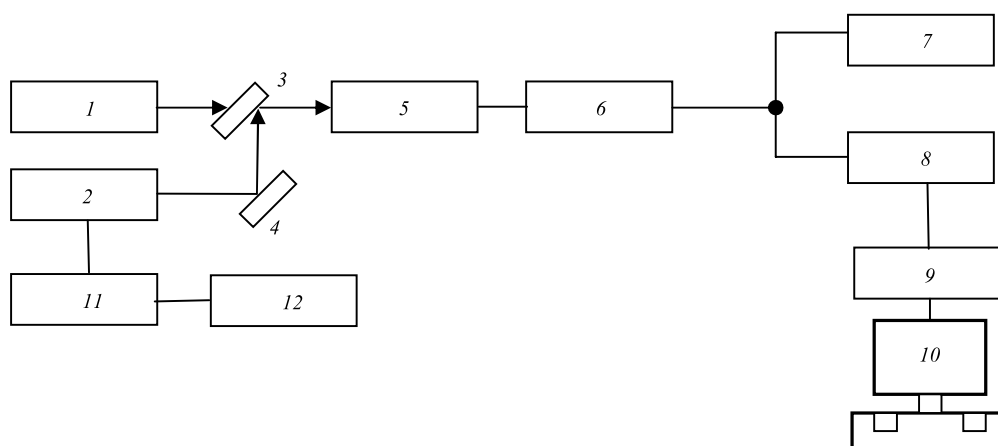


Рис. 1. Схема оптического гетеродинамирования для определения нестабильности частоты и номинального значения длины волны (по среднеквадратичному отклонению):

- 1 — испытываемый He-Ne лазер; 2 — опорный лазер $^3\text{He-}^{20}\text{Ne}/^{127}\text{I}_2$; 3, 4 — поворотные зеркала; 5 — лавинный фотодиод; 6 — усилитель (диапазон частот 0 — 400 МГц); 7 — анализатор спектра; 8 — частотомер; 9 — устройство регистрации сигнала биений; 10 — персональный компьютер; 11 — система стабилизации опорного лазера; 12 — осциллограф



ность частоты генератора подразделяют на кратковременную ($\tau_0 < \tau_{ch}$) и долговременную ($\tau_0 > \tau_{ch}$), где τ_{ch} — характерное время ухода частоты генератора. Этот параметр специфичен для каждого генератора. Нестабильность частоты определяется через среднеквадратическое относительное отклонение как

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot v} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i)^2}{N}}, \quad (4)$$

где $\Delta v / v$ — нестабильность частоты излучения испытуемого лазера; v_i — среднее значение измеряемой частоты биений; N — число отсчетов с частотомера; v_i — номинальное значение частоты.

Значение v_i справедливо в случае, если флуктуации частоты лазерного излучения носят случайный характер. Однако эти изменения частоты со временем не всегда носят случайный характер; на фоне случайных флуктуаций частоты они могут быть выражены неявно.

Методика измерения относительной нестабильности мощности [10]. Измерение относительной нестабильности мощности проводилось методом 3.2, описанным в ГОСТ 25786–83, путем прямого измерения нестабильности напряжения.

Пример зарегистрированных данных с помощью приведенной методики представлен в работе [11].

Данные измерений напряжения, снимаемого при испытаниях с измерительной головки блока приемного устройства, поступают на ПК и регистрируются с помощью программного обеспечения WinDMM300, входящего в комплект мультимера APPA-207.

Полученную зависимость напряжения от времени $U = f(t)$ разбивают на n равных участков ($n = 10$). Затем для каждого участка определяют максимальное и минимальное значения напряжения $U_{\max}$ и $U_{\min}$.

Среднее значение напряжения для каждого участка $\bar{U}_i$ определяют по формуле

$$\bar{U}_i = \frac{U_{i\max} + U_{i\min}}{2}. \quad (5)$$

После этого определяют среднее значение напряжения за время измерения по формуле

$$\bar{U} = \frac{\sum_{i=1}^{10} \bar{U}_i}{10}. \quad (6)$$

Для каждого участка определяют максимальное отклонение напряжения $\Delta U_{i\max}$ от среднего значения за время измерения, с помощью формулы

$$\Delta U_{i\max} = |U_i - \bar{U}|_{\max}. \quad (7)$$

И, наконец, определяют относительную нестабильность средней мощности (в процентах) по формуле

$$S_p = \frac{100}{\bar{U}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{10} \Delta U_{i\max}^2}{9}}. \quad (8)$$

Пример зарегистрированных данных с помощью приведенной методики представлен в работе [11].

Результаты и их обсуждение

Проведем в качестве примера анализ излучения частотно-стабилизированного гелий-неонового лазера типа ЛГН-303.

Построим коррелограмму (график автокорреляции) по точкам сигнала нестабильности оптической частоты биений между опорным и испытуемым (ЛГН-303 № 130) лазерами с помощью формулы [10]:

$$K(\tau) = \frac{1}{(p-m)} \sum_1^{p-m} (v_i - \mu)(v_{i+\tau} - \mu), \quad (9)$$

где p — число измерений частоты биений; m — число измерений частоты биений, отстоящих на лаг τ от первого столбца; μ — среднее значение частоты биений.

На рис. 2 представлена коррелограмма прибора, позволяющая оценить период гармонической составляющей в оптическом излучении лазера. Период составляет более 20 с и увеличивается в дальнейшем с ростом времени усреднения. Это соответствует наличию в спектре лазерного излучения интерференционных шумов. Последние возникают вследствие взаимодействия стоячей

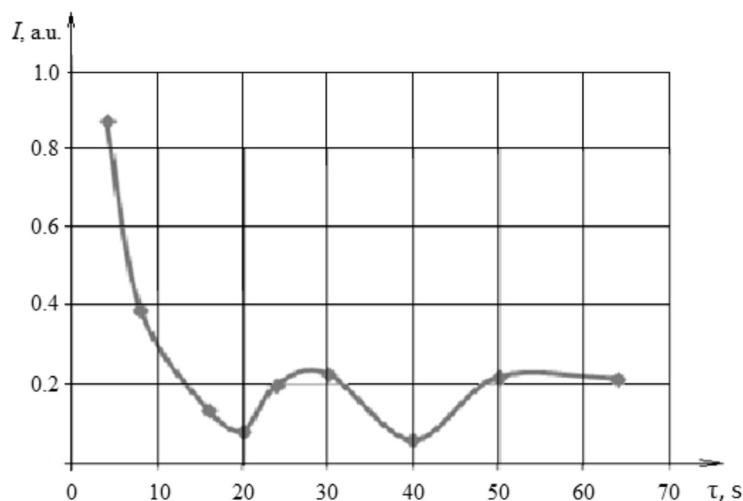


Рис. 2. Автокорреляционная функция стабильности частоты в зависимости от лага

волны резонатора с паразитным излучением той же поляризации. Паразитное излучение объясняется переотражением основного излучения лазера от оптических элементов внутрь резонатора [12]. Ввиду того, что в конструкцию частотно-стабилизированных лазеров входит большое число внешних оптических элементов, к точности их изготовления и установки предъявляются высокие требования. Основными источниками паразитных переотражений в лазерах типа ЛГН-303 являются следующие дефекты их изготовления:

- некачественное просветление оптических элементов;

- недостаточная клиновидность подложек зеркал;

- неточная установка анизотропных кристаллов.

Проанализируем излучения частотно-стабилизированного лазера ЛГН-303 и пассивно стабилизированного волноводного CO_2 -лазера, на основе данных, полученных при измерениях нестабильности их мощностей. Построим зависимости дисперсии Аллана и автокорреляционных функций для вышеупомянутых приборов.

Полученная зависимость дисперсии Аллана для лазера ЛГН-303 от времени усреднения представлена на рис. 3. Можно сделать вывод, что в спектре излучения лазера присутствует фликкер-шум

для всех типов частотно-стабилизированных лазеров [13]. Ввиду того, что постоянная составляющая системы автоподстройки частоты (АПЧ) составляет более 0,8 с, а шумы в области — менее 0,1 с, данный шум активного элемента не контролируется системой АПЧ. В области постоянной времени АПЧ наблюдается наименьшая дисперсия Аллана, в дальнейшем же при увеличении времени усреднения нестабильность возрастает. Наличие в лазерном излучении шума данного типа объясняется неоднородностью электродной системы активного элемента, в частности шероховатостью катодного электрода.

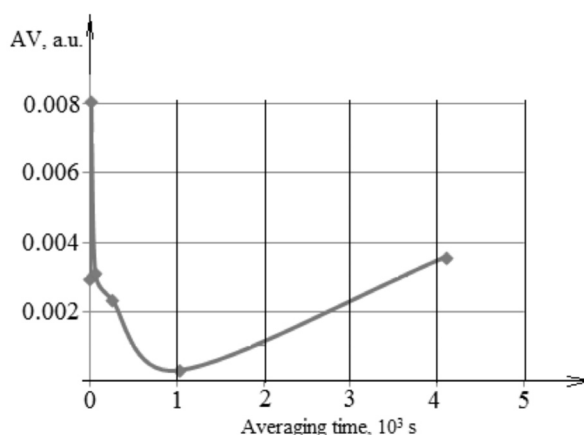


Рис. 3. Дисперсия Аллана в зависимости от времени усреднения для лазера ЛГН-303

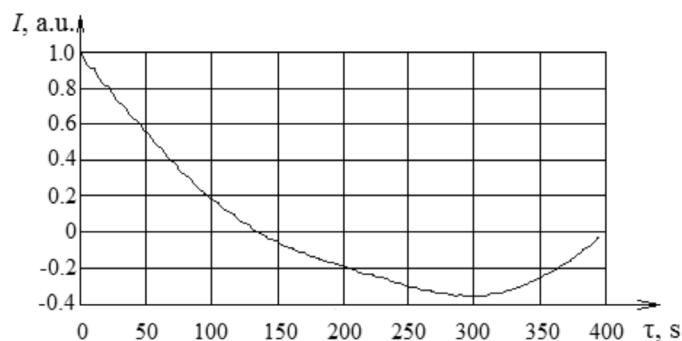


Рис. 4. Автокорреляционная функция стабильности мощности в зависимости от лага для лазера ЛГН-303

Построим график зависимости автокорреляционной функции для лазера ЛГН-303 от лага (рис. 4).

Смешанная форма гармонического сигнала и шума имеет вид спадающей функции с гармонической составляющей. Как видно из рис. 4, гармоническая составляющая почти незаметна на фоне белого шума. Тем не менее, можно определить период гармонической составляющей в спектре шума стабильности мощности; этот период составляет примерно 10 с. Такое значение соответствует тепловым колебаниям, вызванным нестабильностью положения оси диаграммы направленности (ОДН). Указанная нестабильность определяется наличием локальных напряженностей в шейке юстировочных узлов, а также выбором материала этих узлов.

К другому типу газовых лазеров относятся волноводные CO_2 -лазеры [14, 15]. Данные приборы отличает возможность

работы в различных режимах генерации: одномодовом, одночастотном, селективном и неселективном, на фиксированной длине волны, с перестройкой длины волны в области 9 – 11 мкм, с дискретным переключением в пределах заданного набора длин волн. Несмотря на все многообразие возможных типов колебаний, в волноводных резонаторах CO_2 -лазеров их набор ограничивается низшей волноводной модой EH_{11} или суперпозицией двух – трех мод нечетного типа с распределением, эквивалентным моде EH_{11} . Это ограничение связано с жесткой конкуренцией пространственно-связанных типов колебаний при однородном уширении линии усиления в волноводном CO_2 -лазере.

Экспериментальная зависимость мощности излучения CO_2 -лазера (серия LCD – Laser (based on) Carbon Dioxide, т. е. лазер на двуокиси углерода) от времени представлена на рис. 5.

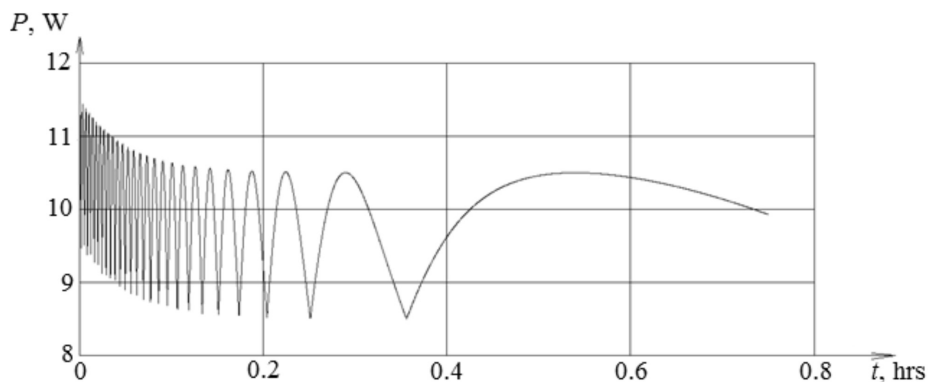


Рис. 5. Зависимость мощности излучения CO_2 -лазера от времени

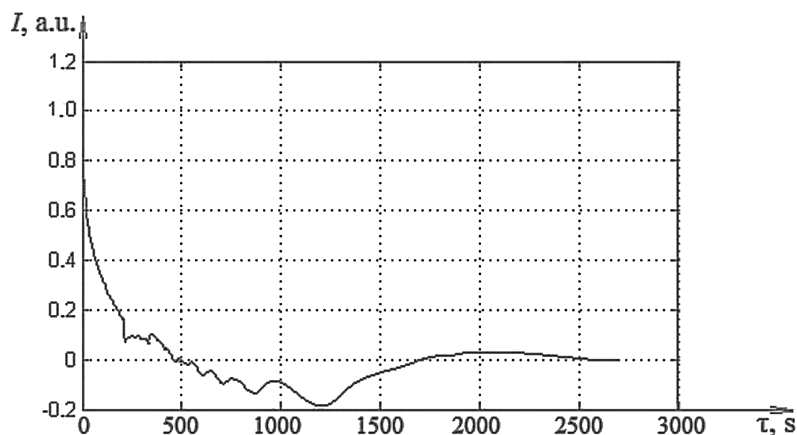


Рис. 6. Автокорреляционная функция мощности излучения CO_2 -лазера в зависимости от лага

Автокорреляционная функция для данных, полученных для CO_2 -лазера, представлена на рис. 6.

Необходимо отметить, что наряду с процессом установления теплового равновесия, в волноводном лазере наблюдается эффект автостабилизации мощности излучения. Эффект связан с влиянием изменения мощности излучения на мощность тепловыделения в резонаторе и, соответственно, на температуру несущих элементов последнего.

Оценка периода гармонической составляющей дает примерное значение в диапазоне 25 – 30 мин. Скорее всего, для данного случая характерны дрейфовые псевдогармонические колебания мощности излучения. Как видно из рис. 6, на интер-

валах временных сдвигов (лагов) до 500 с поведение мощности излучения достаточно жестко детерминировано.

Заключение

В статье приведены результаты работы с газоразрядными лазерами по исследованию шумов лазерного излучения. Показано, что обработка результатов измерений, относящихся к стабильности мощности и частоты по параметру Аллана, наряду с автокорреляционной функцией, однозначно характеризует виды шума. Помимо четкой детерминации шумов в лазерном излучении, показана возможность выявления причин их возникновения и, следовательно, дальнейшего устранения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Губин М.А., Киреев А.Н., Пнев А.Б., Тюрников Д.А., Шелестов Д.А., Шелковников А.С. Методы долговременной стабильности частоты лазеров с газовыми ячейками // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Приборостроение». 2011. № 5-2. С. 199–213.
2. Хирд Г. Измерение лазерных параметров. М.: Мир, 1970. 540 с.
3. Котюк А.Ф. Измерение спектрально-частотных и корреляционных параметров и характеристик лазерного излучения. М.: Радио и связь, 1982. 271 с.
4. Аллан Д.У. Вариации Аллана: история создания, преимущества и недостатки, основные области применения // Гироскопия и навигация. 2015. № 4 (91) С. 3–28.
5. Fang B., Guo X. Modified Allan variance analysis on random errors of MINs // Telkomnika. Telecommunication, Computing, Electronics and Control. 2013. Vol. 11. No. 3. Pp. 1227–1235.
6. Воробьев П.Г., Гуров В.С., Кондрахин А.А., Чуляева Е.Г. Гелий-неоновый частотно-стабилизированный лазер – мера длины в интерферометрах. М.: Горячая Линия – Телеком, 2015. 108 с.
7. Воробьев П.Г. Частотно-стабилизированные лазеры для точных измерений // Вестник Рязанского государственного радиотехнического ун-та. 2012. № 39-2 С. 26–33.
8. Багаев С.И., Чеботаев В.И. Лазерные стандарты частоты // Успехи физических наук. 1986. Т. 148. № 1. С. 143–178.



9. Власов А., Хилов С. Частотно-стабилизированные гелий-неоновые лазеры для интерферометрии // Фотоника. 2007. № 5. С. 7–9.

10. 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.

11. Фаерман В.А., Аврамчук В.С. Применение корреляционного анализа в задачах фильтрации // Труды XIX Междунар.науч.-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии». Томск: Томский политехнический университет (ТПУ). 2013. С. 377–378.

12. Laferrière J., Lietart G., Taws R., Wolszczak S.

Reference guide to fiber optic testing. Sec. ed. Vol. 1. Saint-Etienne: JDSU, 2011. 159 p.

13. Rutman J. Characterization of frequency: a transfer function approach and its application to measurements via filtering of phase noise // IEEE Trans. Instrum. Meas. 1974. Vol. 23. No. 1. Pp. 40–48.

14. Айрапетян В.С. Внерезонаторная параметрическая генерация с плавной и (или) дискретной перестройкой частоты излучения // Вестник НГУ. Сер. Физика. 2009. № 3. С. 20–24.

15. Григорьянц А.Г., Васильцов В.В., Григорьянц А.Г., Васильцов В.В. Пространственная структура излучения мощных волноводных и волоконных лазеров для технологий // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Машиностроение». 2012. № 6. С. 5–33.

Статья поступила в редакцию 24.10.2017, принята к публикации 04.11.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БОДРОВ Александр Иванович — технический директор АО «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
sales@plasmalabs.ru

ЗОРКИН Владимир Сергеевич — инженер I категории АО «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
vladimir.zorkin@mail.ru

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

ПАЮРОВ Александр Яковлевич — старший научный сотрудник АО «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
mera@plasmalabs.ru

КЮН Валерий Владимирович — кандидат физико-математических наук, директор центра АО «Плазма», г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
kvazar@plasmalabs.ru

REFERENCES

[1] M.A. Gubin, A.N. Kireyev, A.B. Pnev, D.A. Tyurikov, D.A. Shelestov, A.S. Shelkovnikov, Metody dolgovremennoy stabilnosti chastoty lazerov s gazovymi yacheykami [Principles of long-term frequency stability of the lasers stabilized on the gas cell], Vestnik MGTU im. N.E. Bauman, Ser. "Priborostroyeniye". (5-2) (2011) 199–123.

[2] H.G. Heard, Laser parameter measurement,

Handbook, J. Wiley & Sons, Inc., New-York, London, Sydney, 1965.

[3] A.F. Kotyuk, Izmereniye spektralno-chastotnykh i korrelyatsionnykh parametrov i kharakteristik lazernogo izlucheniya [Measurement of spectral-frequency and correlation parameters and characteristics of laser radiation]. Moscow, Radio i Svyaz, 1982.

[4] **D.U. Allan**, Variatsii Allana: Istoriya sozdaniya, preimushchestva i nedostatki, osnovnyye oblasti primeneniya [Allan variance: An origin, advantages and disadvantages, substation application areas], Giroskopiya i navigatsiya. No. 4 (91) (2015) 3–28.

[5] **B. Fang, X. Guo**, Modified Allan variance analysis on random errors of MINs, Telekomika. 11 (3) (2013) 1227–1235.

[6] **P.G. Vorobyev, V.S. Gurov, A.A. Kondrakhin, E.G. Chulyayeva**, Geliy-neonovyy chastotno-stabilizirovanny laser – mera dliny v interferometrach [He-Ne frequency-stable laser is a long measure in the interferometers], Hot Line – Telekom, 2015.

[7] **P.G. Vorobyev**, Chastotno-stabilizirovannyye lazery dlya tochnykh izmereniy [Frequency-stable lasers for engineering measurements], Vestnik of RSRTU. No. 39-2 (2012) 26–33.

[8] **S.I. Bagayev, V.I. Chebotayev**, Lazer frequency standarty, Soviet Physics – Uspekhi. 29 (1) (1986) 82–103.

[9] **A. Vlasov, S. Khilov**, Chastotno-stabilizirovannyye geliy-neonovyye lazery dlya interferometrii [Frequency-stable He-Ne lasers for interferometry], Fotonika. (5) (2007) 7–9.

[10] **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

telecommunications], Ryazan State Radioeng. Un-ty, 2016.

[11] **V.A. Fayerman, V.S. Avramchuk**, Primeneniye korrelyatsionnogo analiza v zadachakh filtratsii [Correlation analysis application in the filtering problems], Proc. of the 19th Research-to-Practice Conf. “Current Equipment and Technologies”, Tomsk Polytechnical University (2013) 377–378.

[12] **Laferrière J., Lietaert G., Taws R., Wolszczak S.**, Reference guide to fiber optic testing, 2nd ed., Vol. 1, JDSU, Saint-Etienne, 2011, P. 159.

[13] **J. Rutman**, Characterization of frequency: a transfer function approach and its application to measurements via filtering of phase noise, IEEE Trans. Instrum. Meas. 23 (1) (1974) 40–48.

[14] **V.S. Ayrapetyan**, Vnerezonatornaya parametricheskaya generatsiya s plavnoy i (ili) diskretnoy perestroykoy chastoty izlucheniya [Extracavity parametrical generation with continuous and/or discrete emission frequency tuning], Vestnik NGU, Ser. Fizika. (3) (2009) 20–24.

[15] **A.G. Grigoryants, V.V. Vasiltsov, A.G. Grigoryants, V.V. Vasiltsov**, Prostranstvennaya struktura izlucheniya moshchnykh volnovodnykh i volokonnykh lazerov dlya tekhnologii [Emission spatial structure of high-power waveguide and optical fiber lasers for industrial engineering], Vestnik MGTU im. N.E. Bauman. Ser. “Mashinostroyeniye”. (6) (2012) 5–33.

Received 24.10.2017, accepted 04.11.2017.

THE AUTHORS

BODROV Alexander I.

Joint-stock company “Plasma”

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

ZORKIN Vladimir S.

Joint-stock company “Plasma”

24 Tsiolkovskogo St., Ryazan, 390000, Russian Federation
vladimir.zorkin@mail.ru

CHULYAEVA Elena G.

Joint-stock company “Plasma”

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

PAYUROV Alexander Ya.

Joint-stock company “Plasma”

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

KYUN Valeriy V.

Joint-stock company "Plasma"

24 Tsiolkovskogo St., Ryazan, 390000, Russian Federation

kvazar@plasmalabs.ru

DOI: 10.18721/JPM.10407

УДК 533.9

ОСОБЕННОСТИ ЭВОЛЮЦИИ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ ЛАЗЕРА В ПЛАЗМЕ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА

**А.И. Кудюкин, П.А. Борисовский, С.В. Гаврилов, М.Н. Махмудов,
Е.Н. Моос, Г.В. Киселев, Л.И. Киселева, В.А. Степанов**

Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина,
г. Рязань, Российская Федерация

Влияние ионно-плазменных потоков на поверхность катода в гелий-неоновой плазме газового разряда изучено методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и электронного микрозондового анализа, включающего анализ атомного состава при профилировании по глубине и в растровом режиме. Исследования дополнялись моделированием дугового разряда в условиях вакуума дугогасительных камер вплоть до плавления сплавных металлических электродов при критических режимах разряда (в условиях повышенной мощности). Во всех случаях выявлены процессы, приводящие к деградации и разрушению поверхности катода.

Ключевые слова: плазма; ионно-плазменный поток; газовый разряд; абляция; поликристаллическая структура; морфология поверхности

Ссылка при цитировании: Кудюкин А.И., Борисовский П.А., Гаврилов С.В., Махмудов М.Н., Моос Е.Н., Киселев Г.В., Киселева Л.И., Степанов В.А. Особенности эволюции морфологии поверхности электродов лазера в плазме газового разряда // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 92–99. DOI: 10.18721/JPM.10407

EVOLUTION FEATURES OF LASER ELECTRODE-SURFACE MORFOLOGY IN THE GAS DISCHARGE PLASMA

**A.I. Kudyukin, P.A. Borisovsky, S.V. Gavrilov, M.N. Makhmudov,
E.N. Moos, G.V. Kiselyov, L.I. Kiselyova, V.A. Stepanov**

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

The effect of plasma flows on the cathode surface in the He-Ne plasma of a gas discharge has been investigated using X-ray photoelectron spectroscopy, the electron microprobe analysis, including atomic composition analysis in the depth profiling and in the raster mode. The studies were supplemented by modeling of the arc discharge in vacuum arc-quenching chambers up to the melting of the metal-alloyed electrodes based on the two-component systems under critical discharge rate (under increased power). In all instances there were identified the processes leading to the degradation and destruction of the cathode surface. Method of electronic microprobe analysis revealed a change in the composition of chromium-copper alloy electrode in the depth due to thermal effects at all stages of production, testing and service. In the



zone of the melted electrodes, we observed redistribution of the main components and a substantial decrease in the oxygen concentration.

Keywords: plasma; ion-plasma flow; gas discharge; ablation; polycrystalline structure; surface morphology

Citation: A.I. Kudyukin, P.A. Borisovsky, S.V. Gavrilov, M.N. Makhmudov, E.N. Moos, G.V. Kiselyov, L.I. Kiselyova, V.A. Stepanov, Evolution features of laser electrode-surface morphology in the gas discharge plasma, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 92–99. DOI: 10.18721/JPM.10407

Введение

Физические процессы, происходящие при взаимодействии электродов с плазмой, приводят к необратимым изменениям состояния их поверхности. Сведения о процессах блистеринга (вспучивание поверхности) в приборах плазменной электроники крайне немногочисленны, и по данной теме имеются лишь единичные публикации [1, 2]. В то же время при изучении эволюции состояния катодов на основе системы Al-Mg (оксиды алюминия с добавкой оксидов магния; катоды – элементы конструкции гелий-неоновых лазеров) [3], исследованиях поверхности электродов магнитоуправляемых контактов (система Fe-Ni) [4], электродов вакуумных дуговых прерывателей (система Cu-Cr) [5] остаются невыясненными причины их деградации и разрушения. Сохраняется также актуальность исследования процессов и механизмов взаимодействия ионно-плазменных потоков с поверхностью данных сплавов и легированных электродных систем [6].

Перечисленные выше направления исследований входят в круг известных проблем, относящихся к взаимодействию ионно-плазменных потоков с поверхностью. С ними связаны процессы разрушения оболочек (абляция) летательных аппаратов в авиакосмических отраслях, оболочек реакторов атомной индустрии (особенно реакторов типа токамак), а также технологических процессов формирования пленочных систем и покрытий, в частности в микро- и нанoeлектронике.

В настоящей статье представлены результаты исследования эволюции поверхности электродов в газовом разряде (катоды гелий-неоновых лазеров) и моделирование подобных изменений морфологии двухкомпонентных электродов при развитии дуго-

вого разряда в контролируемых условиях вакуума дугогасительных камер.

Изучение такого рода сложных процессов оказалось возможным в результате применения целого комплекса методов:

рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии;

электронного микрозондового анализа при профилировании по глубине и в растровом режиме;

атомно-силовой микроскопии.

Результаты исследований и их обсуждение

При послойном анализе поверхности алюминиевого катода гелий-неонового лазера, содержащего малую концентрацию легирующих примесей магния и железа, обнаружен выраженный слой углерода на поверхности, уровень которого убывает до фонового значения на глубине в анализируемых слоях электродного материала (рис. 1). Обозначения $1s$, $2s$ и $2p$ показыва-

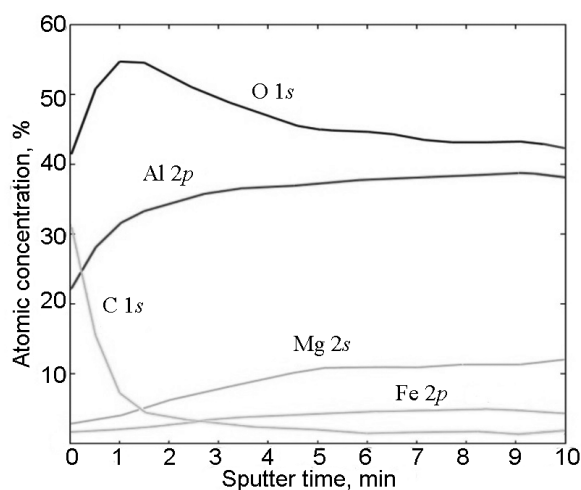


Рис. 1. Результат послойного анализа поверхности катода системы Al-Mg гелий-неонового лазера (зависимость концентрации атомов от времени распыления)

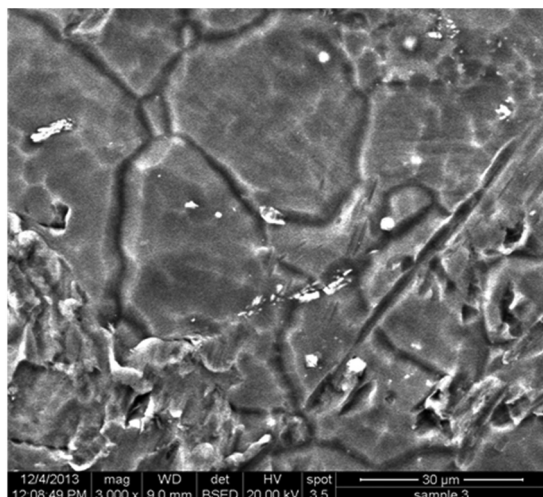


Рис. 2. Морфология поверхности катода в результате воздействия гелий-неоновой плазмы (микрофотография получена с помощью растрового электронного микроскопа)

ют заполнение электронного уровня каждым элементом.

Одновременно при этом наблюдается выраженный рост концентрации алюминия (до стабильной величины) и кислорода. Последняя, впрочем, спадает, выявляя слой повышенного окисления матрицы приповерхностной зоны. Синфазно с содержанием алюминия изменяется содержание магния, наблюдается его сегрегация на поверхность эмиссионного слоя, причем менее значительный рост его аналитического сигнала от магния, по сравнению с алюминием, подтверждает этот результат, ранее полученный методом Оже-спектроскопии [3]. Указанный метод, как известно, чувствителен к самым верхним атомным слоям.

С помощью растровой электронной микроскопии выявлено декорирование плазмой поликристаллической структуры изучаемой поверхности катода гелий-неонового лазера в результате воздействия гелий-неоновой плазмы (рис. 2). Микрокристаллиты имели средние размеры около 30 мкм.

Явление блистеринга, обнаруженное нами на поверхности катода гелий-неонового лазера, ранее было изучено на поверхности обшивки космических летательных аппаратов и в ядерных установках

типа токамак. Обычно этот эффект проявляется в условиях, когда энергия ионных пучков превышает десятки и сотни кэВ [6]. Внешний вид и атомный элементный состав блистеров на электродах гелий-неонового лазера (куполообразные образования) представлены на рис. 3, 4.

Размер блистера составляет около 40 мкм. В зоне анализа, отмеченной на рис. 3 квадратом, количество атомов неона в блистере достигает 2,11 ат.% от основного вещества катода — оксида алюминия (рис. 4). По результатам анализа методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, в поверхностном слое концентрация алюминия регистрируется на уровне 30,52 ат.%; поверхностное же состояние атомов кислорода и углерода при этом составляет в зоне анализа 62,8 и 4,49 ат.% соответственно. Эти данные коррелируют с наблюдавшимся снижением мощности излучения активных элементов, вышедших из строя. Мощность при этом упала с 0,50 мВт до 0,13 — 0,01 мВт. В то же время оптимальный рабочий ток увеличился с 3,5 до 4,1 мА, а ток срыва разряда увеличился с 3,2 до 4,2 мА.

Характер свечения разряда (бледно-синий цвет является присущим разряду гелия) указывает на снижение содержания

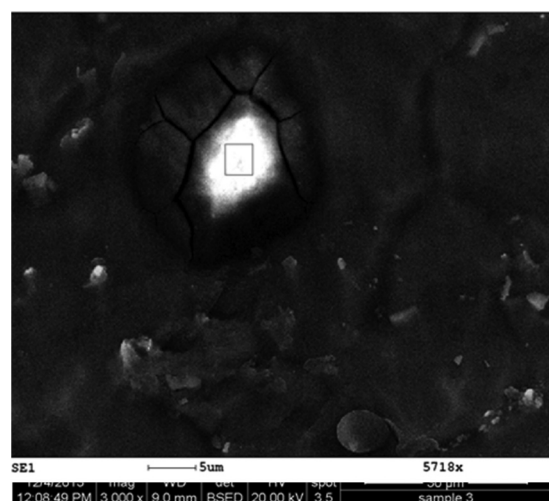


Рис. 3. Эффект блистеринга на поверхности алюминиевого катода гелий-неонового лазера после испытаний (анализируемый участок отмечен квадратом)

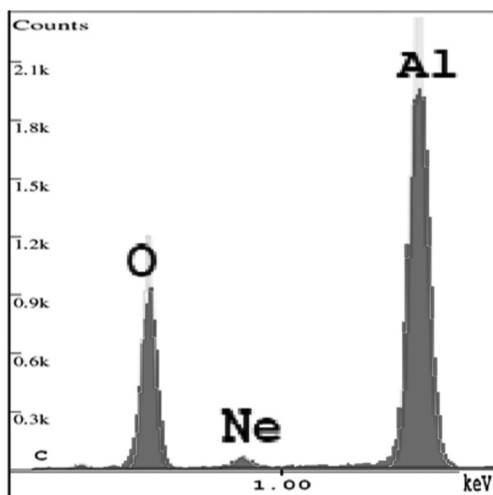


Рис. 4. Атомный состав блистера на поверхности алюминиевого катода (зона анализа отмечена квадратом на рис. 3) после 100 тыс. ч воздействия гелий-неоновой плазмы (это длительность испытания активного элемента)

неона в рабочей смеси, что можно объяснить накоплением неона в блистерах (см. рис. 3). В пользу этого объяснения говорит увеличение как оптимального рабочего тока, так и тока срыва разряда.

В ходе исследования представилось важным сравнить полученные результаты с поведением поверхности катода на основе двичной системы Cu-Cr в условиях дугового разряда (напомним, что в гелий-неоновых лазерах это система Al-Mg). Это важно для выявления общих закономерностей эволюции состава и морфологии поверхности, для изучения режимов воздействия ионно-плазменных потоков повышенной энергии в вакууме с целью определения предельной мощности разрушающих потоков. При этом исключался возможный эффект блистеринга (среда развития разряда – вакуум).

Компьютерное моделирование воздействия плазмы дугового разряда на электроды Cu-Cr в условиях вакуума, которое учитывало теплопроводность данного сплава, мощность и время существования дуги, также выявило особенности эволюции морфологии и состава их поверхности (рис. 5). В частности, концентрации атомов меди (основное вещество сплава) и кисло-

рода на поверхности оказались выше объемных значений.

Точечное электронное зондирование образцов катода системы Cu-Cr выявило зоны, содержание меди в которых снижается с 92,4 до 78,2 ат.% при увеличении глубины, что указывает на резко выраженный процесс ее сегрегации на поверхности. В катодной области существует несколько энергетических процессов в результате воздействия ионов, ускоренных в прикатодном пространстве [5]. Кроме того, автоэлектроны, инициирующие дуговой разряд, создают в центрах эмиссии высокие плотности тока, стимулирующие нагрев этой зоны; при этом процесс сопровождается разбрызгиванием вещества электродов. Данный процесс, протекающий в вакууме, вызывает снижение концентрации кислорода в зоне плавления более чем в два раза (с 4,9 до 2,2 ат.%).

Развитый рельеф поверхности, как было показано в работах [1, 7], способен значительно влиять на процессы распыления и расплавления компонентов сплава при воздействии вакуумной дуги. С увеличением угла падения ионов, связанного с морфологическими особенностями поверхности, коэффициент распыления снижается,

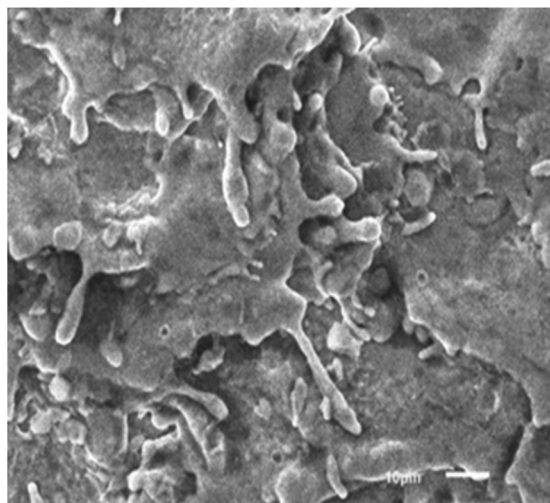


Рис. 5. Морфология поверхности катода системы Cu-Cr в результате воздействия мощного дугового разряда в условиях вакуума (итог компьютерного моделирования процесса в критическом режиме)

по сравнению с таковым для неповрежденной поверхности. Это обусловлено тем, что только часть распыленных атомов покидает поверхность, большая же их часть перераспыляется на соседние участки, изменяя коэффициент усиления поля, а следовательно, и автоэлектронные процессы в дуге.

Трансформация рельефа поверхностных слоев также способна влиять на перераспределение элементного состава [1] во время действия на них вакуумного дугового разряда. При этом существенным фактором является то обстоятельство, что в ходе этого процесса на поверхность стремятся преимущественно легкосегрегирующие вещества (атомы меди в последнем случае). Поэтому медью обогащаются области, которые в большей мере участвуют в процессе распыления, — это верхние слои и области возвышенностей; в глубоких же участках растет концентрация более тугоплавкого компонента.

Процессы сегрегации атомов магния наблюдались для катодов двойных систем Al-Mg [3] гелий-неоновых лазеров.

Заключение

В сравнительных исследованиях дугового разряда в среде активного элемента гелий-неонового лазера и в условиях вакуума выявлены общие закономерности эволюции элементов электродных материалов.

Одновременно обнаружена специфика развития дугового разряда в условиях вакуума. В частности, установлено двукратное снижение концентрации кислорода в процессе деградации электрода (с 5,0 до 2,2 ат.%) и его уход из объема электродов. Из термодинамических оценок следует, что кислород предпочтительно сконцентрирован в зонах с преобладанием легко окисляемых компонентов (в анализированных двойных катодных системах это магний и медь, соответственно).

Исследование возможных предельных изменений указанных характеристик поверхности электродов в условиях интенсивного и многократного воздействия дугового разряда на электроды камеры также обнаруживает общие закономерности гелий-неоновой среды лазера в условиях вакуума.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беграмбеков Л.Б. Модификация поверхности твердых тел при ионном и плазменном воздействии. М.: МИФИ, 2001. 34 с.
2. Строкань Г.П. Процессы разрушения поверхности электрода в плазме высокочастотного разряда // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 9. С.112–115.
3. Ерошкин М.В., Киселев Г.В., Моос Е.Н. Распыление поверхности катода He-Ne лазера // Известия РАН. Серия физическая. 2014. Т. 78. № 6. С. 686–689.
4. Арушанов К.А., Зельцер И.А., Карабанов С.М., Майзельс Р.М., Маслаков К.И., Моос Е.Н., Наумкин А.В. Ионно-индуцированное модифицирование контактных поверхностей // Известия РАН. Серия физическая. 2012. Т. 76. № 6. С. 750–754.
5. Kudyukin A.I., Moos E.N., Rott A.T., Rybin N.B., Stepanov V.A. Arc interaction with electrodes // Proceed. 11th Intern. Vac. Electr. Sourc. Conf. 2016. Seoul National University (SNU). Pp. 41–42.
6. Бондарева А.Л., Змиевская Г.И. Моделирование флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга // Известия РАН. Серия физическая. 2004. Т. 68. № 3. С. 336–339.
7. Barkan R., Lafferty J.M., Lee T.N., Talento J.L. Development of contact materials for vacuum interrupts // IEEE. Trans. Power Appl. and Syst. 1971. Pp. 1–9.
8. Гаврилов С.В., Моос Е.Н. Появление структурных особенностей на потенциальном барьере // Радиотехника и электроника. 2010. Т. 55. № 2. С. 225–226.
9. Зельцер И.А., Кукушкин С.А., Моос Е.Н. Характеристики ионной и электронной эмиссии при модуляции потенциального барьера // Известия РАН. Серия физическая. 2008. Т. 72. № 7. С. 873 – 877.
10. Лукацкая И.А. Исследование коммутационного ресурса вакуумных дугогасительных камер // Сборник статей сотрудников ВЭИ им. В.И. Ленина «Вакуумные дугогасительные камеры». 2008. С. 126–129.
11. Белкин Г.С., Лукацкая И.А. Исследование свариваемости контактов вакуумных дугогасительных камер // Сборник статей сотрудников ВЭИ им. В.И. Ленина «Вакуумные дугогасительные камеры». 2008. С. 130–135.

Статья поступила в редакцию 06.10.2017, принята к публикации 11.10.2017.

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

КУДЮКИН Александр Игоревич — аспирант 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
a.kudykin@rsu.edu.ru

БОРИСОВСКИЙ Петр Андреевич — научный сотрудник 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
borisovsky@physicist.net

ГАВРИЛОВ Сергей Владимирович — научный сотрудник 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
Gavrilov@physicist.net

МАХМУДОВ Марат Наильевич — кандидат физико-математических наук, начальник управления научной и инновационной деятельности Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

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

МООС Евгений Николаевич — доктор технических 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
Moos@physicist.net

КИСЕЛЕВ Георгий Владимирович — научный сотрудник 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
Kiselyov@physicist.net

КИСЕЛЕВА Людмила Ивановна — научный сотрудник 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
Kiselyova@physicist.net

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

REFERENCES

[1] **L.B. Begrambekov**, Modifikatsiya poverkhnosti tverdykh tel pri ionnom i plazmennom vozdeystvii [Modifying the solid surface under ionic and plasmous attacks], Moscow, MIFI, 2001.

[2] **G.P. Stokan**, Electrode surface erosion in a high-frequency discharge plasma, JTP. 46 (9) (2001) 1175–1178.

[3] **M.V. Eroshkin, G.V. Kiselev, E.N. Moos**,

Sputtering the surface of a He-Ne laser cathode, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 78 (6) (2014) 485–488.

[4] **K.A. Arushanov, I.A. Zeltser, S.M. Karabanov, et al.**, Ion-induced modification of contact surfaces, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 76 (6) (2012) 669–673.

[5] **A.I. Kudyukin, E.N. Moos, A.T. Rott, et al.**, Arc interaction with electrodes, Proceed. 11th Inter. Vac. Electr. Sourc. Conf., Seoul National University (SNU). (2016) 41–42.

[6] **A.L. Bondareva, G.I. Zmiyevskaya**, Fluctuation stage simulation of a high-temperature blistering, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 68 (3) (2004) 336–339.

[7] **R. Barkan, J.M. Lafferty, T.N. Lee, et al.**, Development of contact materials for vacuum interrupts, IEEE, Trans Power Appl. and Syst. 90 (1971) 1–9.

[8] **S.V. Gavrilov, E.N. Moos**, Structural features at potential barrier, Journal of Communications Technology and Electronics. 55 (2) (2010) 225–226.

[9] **I.A. Seltzer, S.A. Kukushkin, E.N. Moos**, Ion and electron characteristics at potential barrier modulation, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 72 (7) (2008) 873–877.

[10] **I.A. Lukatskaya**, Issledovanie kommutatsionnogo resursa vakuumnykh dugogasitel'nykh kamer [Investigation of a commutation life of vacuum arc-quenching chambers], Sbornik statey sotrudnikov VEI im. V.I. Lenina «Vakuumnye dugogasitel'nye kamery» (2008) 126–129.

[11] **G.S. Belkin, I.A. Lukatskaya**, Issledovanie svarivaemosti kontaktov vakuumnykh dugogasitel'nykh kamer [Investigation of contacts' weldability of vacuum arc-quenching chambers], Sbornik statey sotrudnikov VEI im. V.I. Lenina «Vakuumnye dugogasitel'nye kamery» (2008) 130–135.

Received 06.10.2017, accepted 11.10.2017.

THE AUTHORS

KUDYUKIN Alexander I.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
40 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation
a.kudyukin@rsu.edu.ru

BORISOVSKY Pyotr A.

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

GAVRILOV Sergey V.

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

MAKHMUDOV Marat N.

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

MOOS Evgueniy N.

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

KISELYOV Georgiy V.

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

KISELYOVA Lyudmila I.

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



STEPANOV Vladimir A.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin

40 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation

stepanov@physicist.net

DOI: 10.18721/JPM.10408

УДК 539.2; 004.94

СУБПИКОСЕКУНДНАЯ ДИНАМИКА ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛИАЛАНИНОВ

Т.И. Зезина, О.Ю. Цыбин

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

На субпикосекундной шкале времени вычислены мгновенные значения дипольного момента олигопептидов аланина в вакууме и в водном растворе с целью оценки влияния внешних воздействий: температуры, а также амплитуды и ориентации вектора напряженности внешнего электростатического поля. Компьютерное моделирование осуществляли методом молекулярной динамики. Динамические сценарии при воздействии внешнего электростатического поля свыше 100 МВ/м были получены для олигопептидов аланина различной длины (от 2 до 24 групп), находящихся в водной среде и вакууме, с временным шагом 1 фс и временем моделирования до 100 нс. Вычисленные сценарии можно использовать для дальнейшего анализа и обобщенного описания структурных свойств и конформационной динамики молекул. Освоенный программный компьютерный комплекс пригоден для вычисления представительных молекулярных сценариев, включая поведение различных по структуре пептидов и белков в вакууме, растворах, а также под воздействием электрического поля при различных температурах.

Ключевые слова: биомолекула; пептиды; компьютерное моделирование; молекулярная динамика; дипольный момент; биомолекулярная электроника

Ссылка при цитировании: Зезина Т.И., Цыбин О.Ю. Субпикосекундная динамика дипольного момента молекулярных полиаланинов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 100–110. DOI: 10.18721/JPM.10408

SUBPICOSECOND DYNAMICS OF THE MOLECULAR POLYALANINE DIPOLE MOMENT

T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin

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

Instantaneous dipole moments of polyalanine peptides in vacuum and in the aqueous medium have been calculated on the picosecond time scale in order to evaluate the external influence of temperature, of the electrostatic field's amplitude and direction. Computer simulation was performed using the molecular dynamics method. The dynamic scenarios induced by the external electrostatic field above 100 MV/m were obtained for polyalanine molecules of different lengths (from 2 to 24 groups) placed in vacuum and in aqueous medium, the time step of 1 fs and the simulation time up to 100 ns being taken. The simulated scenarios can be used for a further analysis and a generalized description of structural properties and conformational



dynamics of molecules. The mastered software packages are appropriate for computing the representational scenarios of biomolecular behavior under various conditions.

Key words: biomolecule; peptide; computer simulation; molecular dynamics; dipole moment; biomolecular electronics

Citation: T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin, Subpicosecond dynamics of the molecular polyalanine dipole moment, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 100–110. DOI: 10.18721/JPM.10408

Введение

Пространственная структура и динамика белковых молекул обеспечивают множество биологических функций в живой природе, а также подобных сценариев в искусственных системах. Исследования изолированных белков и пептидов позволяют получать биологически значимые данные о первичной и вторичной структурах, межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействиях [1 – 9]. В водных растворах пептиды и белки существуют в различных вторичных структурных состояниях (β -листы, альфа-спирали, 3_{10} -спирали и другие), которые для пептидов в основном или частично сохраняются при переходе в газовую фазу [1 – 3]. Экспериментально показано, например, что в вакууме дикаатионы полиаланинов и полиглицинов сохраняют тенденцию к формированию структуры альфа-спирали [1]. Благодаря сохранению нативной структуры в газовой фазе, а также биологической значимости и медицинским приложениям, полиаланины представляют собой актуальный объект всестороннего изучения. Большое значение имеют исследования воздействия электрических статических и переменных полей на структуру полиаланинов. Дальнейшее действие электрических сил способствует возникновению нетепловых эффектов перестройки структуры молекулы во внешнем поле, усиленных упорядоченной ориентацией интегральных по объему молекулы электрических дипольных моментов (ЭДМ) [4 – 9].

Пространственная структура полипептида определяет интегральный ЭДМ, который за счет этого приобретает свойства оценочного параметра структурной геометрии и динамики. В относительно слабом, по сравнению с типичными полями атомных подсистем, электростатическом поле

($E < 10^8$ В/м) эффекты поляризации близки к линейным, средний статический ЭДМ приблизительно соответствует уравнению Ланжевена – Дебая:

$$p = \mu_0^2 E / 3kT,$$

где p – значение поляризации, μ_0 – значение ЭДМ, kT – термодинамическая энергия, определяемая произведением постоянной Больцмана на значение абсолютной температуры [2, 4 – 8].

Пептиды, обладающие свойствами пьезоэлектриков, например дифенилаланин, образуют упорядоченные агрегации даже в слабых полях [9]. Наряду с экспериментальными методами радиоимпедансной спектроскопии [10 – 12], поиск упорядоченных структур в слабых полях осуществляется компьютерным моделированием. Такие исследования востребованы, например, для выяснения процессов молекулярной самоорганизации в растворах и пленках. В более сильном поле ($E = 1$ В/нм) вполне компьютерное исследование дипептида аланина в воде [4]. Подобные сильные поля типичны для наносистем, а в микролокальных лабораторных экспериментах создаются вблизи микроскопических дефектов поверхности, например у вершины острий.

Подобные задачи возникают в последние годы не только в биологии и медицине, биофизике и биохимии, но также в связи с актуальностью создания элементной базы биомолекулярной электроники: нового научно-технического и технологического гибридного комплекса твердотельной электроники, биомолекул и биомолекулярных метаматериалов [11 – 14]. В электродинамике и электронике биомолекулы предстают в большей степени не как носители биологических функций, а как распределенные в конфигурационном пространстве атомные кластеры, имеющие физические

свойства системы нелинейно связанных квантовых осцилляторов. Рассматриваются, например, конфигурации нано- или микроэлектронных цепей с включением в них белковой молекулы, при этом свойства цепей существенно зависят от ЭДМ молекулы [13 – 14].

В перспективных разработках элементной базы электроники ЭДМ может стать важным параметром, определяющим процессы ввода и сбора данных, полевые и температурные зависимости, распределение электрических потенциалов и энергии взаимодействия с поверхностью твердого тела и т. п. Для обеспечения такой перспективы требуется создать и проанализировать соответствующие базы данных значений ЭДМ различных молекул, динамических сценариев в условиях вакуума и растворов, взаимодействия с твердыми телами, изменения температуры и электрического поля. Интегральный молекулярный ЭДМ и его динамические сценарии потребуется вычислять при проектировании гибридных электронных элементов и устройств.

В данной работе выполнено компьютерное моделирование мгновенных (интегральных по объему атомного кластера) значений ЭДМ олигопептидов аланина на субпикосекундной шкале времени в вакууме и в водном растворе; эти значения необходимы для оценки влияния внешних воздействий: температуры, а также амплитуды и ориентации вектора напряженности внешнего электростатического поля на зависимость ЭДМ от времени.

Метод вычислений

Компьютерный метод молекулярной динамики (МД) был реализован путем совмещения ряда прикладных пакетов программ в единый исследовательский комплекс. Компьютерные модели, представляющие собой альфа-спирали олигопептидов аланина, создавали в пакете Avogadro [15], где получали пространственные распределения атомной подсистемы. Дальнейшая их модификация, включающая построение окружающей среды молекул воды, оптимизацию геометрии системы, моделирование пошаговой эволюции биомолекулярной системы

методом МД с использованием силового поля CHARMM27 [16], оценка геометрических изменений в системе и расчет величины дипольного момента были реализованы при помощи программ NAMD [17] и VMD [18]. Для пептидов аланина различной длины в водной среде и вакууме были получены динамические сценарии с временным шагом 1 фс и временем моделирования до 100 нс под воздействием внешнего электростатического поля $E > 10^8$ В/м.

Мгновенные значения ЭДМ на каждом временном шаге вычисляли путем сложения индивидуальных моментов:

$$\mu = \sum_{n=1}^N q_n \mathbf{r}_n.$$

Изменение поляризуемости и электронные переносы, вызванные пространственными структурными переходами и внешним полем $E > 10^8$ В/м, считали несущественными, чему есть подтверждающие обоснования в литературе [2, 7, 8]. Исследования методом МД проводились путем построения временных реализаций длительностью от 100 пс до 100 нс при различных условиях в вакууме и в водной среде.

Температуру T варьировали в пределах от 200 до 500 К. Амплитуду внешнего электростатического поля E в программе NAMD задавали в ккал/(моль $\cdot \text{\AA} \cdot e$), где e — заряд электрона. Поле изменяли в пределах от 0 до 10 ккал/(моль $\cdot \text{\AA} \cdot e$), где в единицах В/м наибольшее значение E соответствует $\approx 4,34 \cdot 10^9$ В/м, то есть полю 434 МВ/Å, относительно слабому, по сравнению с типичными межатомными полями.

Водная среда формировалась в виде заполненного трехточечными моделями молекул воды прямоугольного параллелепипеда со сторонами, отдаленными, как минимум, на 10 Å от биомолекулы для каждого олигопептида, состоящего из N звеньев аланина ($N = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 16$), и на 15 Å — для более крупных пептидов (Ala_{24} и Ala_{20}). Для ряда траекторий аланина в водной среде задавали периодические граничные условия с использованием термостата Ланжевена. Для всех сценариев дальнедействующие взаимодействия между атомами плавно спадали, начиная с расстояния в 10 Å, и обнулялись



к границе отсечения дальнodelствующих взаимодействий, равной 12 Å. Компоненты ЭДМ в плоскости, поперечной первичной цепи, имели высокие значения: около 3,5 – 3,7 Д, но из-за периодической смены пространственного направления при суммировании вдоль первичной цепи они не вносили существенного вклада в интегральное значение. В результате вычисленный ЭДМ представлял собой интегральный вектор, направление которого выбрано от С-конца к N-концу.

Верификация вычисленных сценариев была основана на сопоставлении с имеющимися литературными данными, на многократных вычислениях реализаций с варьированием начальных условий, на аналитических проверках усредненных реализаций.

Результаты вычислений и их обсуждение

Рассмотрим типичные вычисленные зависимости от времени интегрального ЭДМ олигопептидов аланина с $N = 2 - 24$ (N – число аминокислотных групп в пептидной цепи). На рис. 1 – 5 приведены основные характеристики ЭДМ в воде и в вакууме при различных значениях стационарной температуры окружения ($T = 200 - 500$ К) и молекулы, а также амплитуды напряженности внешнего электростатического поля $E = 0,1; 1,0; 2,0; 5,0; 10,0$ ккал/(моль · Å · е). Зависимости мгновенных значений интегрального по объему молекулы ЭДМ от времени получены с наибольшим разрешением в 1 фс «молекулярного» времени как в коротких, так и в обзорных реализациях длительностью до 100 нс. На реализациях наблюдаются как стабильные стационарные динамические сценарии в виде колебаний относительно среднего значения ЭДМ, так и быстрые глобальные конформационные бифуркации.

На рис. 1 приведены типичные временные реализации ЭДМ молекулы Ala₁₂ при 300 К. На рис. 1, а показан график эволюции во времени ЭДМ на протяжении 100 пс для олигопептида аланина Ala₁₂ в вакууме под действием внешнего электростатического поля, равного 1 ккал/(моль · Å · е) $\approx 4,34 \cdot 10^8$ В/м; на рис. 1, б – на протяже-

нии 100 нс в водной среде. В водной среде на всем протяжении реализации амплитуда дипольного момента пептида остается в среднем практически постоянной и лишь колеблется вокруг среднего значения, причем имеются колебания как относительно низкой частоты, порядка 100 МГц – 1 ГГц, так и предельно высокой, неразличимой на данном графике. Для определения диапазона этих высоких частот требуются дополнительные исследования. На рис. 1, а показан пример быстрого, за время приблизительно 12 пс, конформационного перехода молекулы в вакууме во внешнем электростатическом поле 1 ккал/(моль · Å · е). Происходит, как видно, спонтанное изменение пространствен-

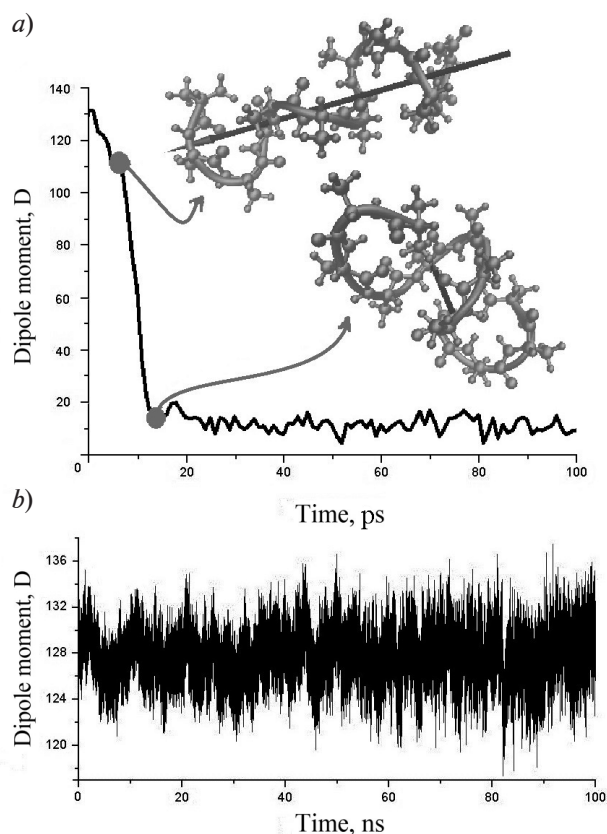


Рис. 1. Типичные временные реализации электрического дипольного момента (ЭДМ) молекулы Ala₁₂ при 300 К: а – скачок ЭДМ в результате быстрого спонтанного пространственного перехода Ala₁₂ в вакууме под действием внешнего электростатического поля в $4,34 \cdot 10^8$ В/м; б – динамика дипольного момента Ala₁₂ в водной среде

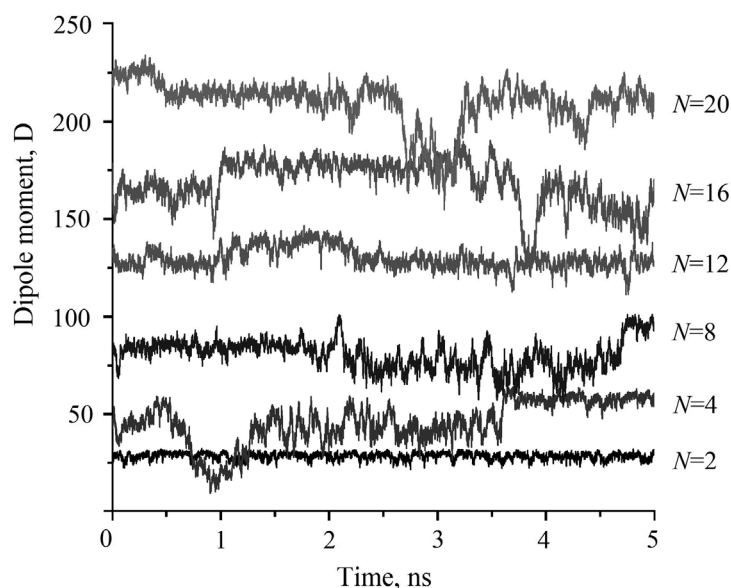


Рис. 2. Типичные временные зависимости ЭДМ олигопептидов аланина (число звеньев $N = 2 - 20$) в воде при 300 К

ной структуры в сжатое квазиспиральное состояние. Быстрому глобальному переходу пептида из одного пространственного состояния в другое соответствует значительное изменение величины его дипольного момента от начального (приблизительно 130 Д) к конечному (около 10 Д), сохраняющемуся затем на протяжении почти 100 пс. Стрелками на рисунке обозначены векторы ЭДМ, имеющие до и после перехода различные значения длины и углов ориентации. В период между пространственными бифуркациями флуктуации величины ЭДМ относительно среднего значения имели квазислучайный характер для всех молекул; вычисленная функция распределения была близка к Гауссовой.

На рис. 2 приведены типичные зависимости от времени для ЭДМ олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в воде, при 300 К. Эти зависимости были использованы для построения статистических распределений.

Гистограммы средних значений ЭДМ молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в нулевом электростатическом поле ($E = 0$) при $T = 300$ К в водной среде представлены на рис. 3, а, в вакууме — на рис. 3, б. Среднеквадратичные отклонения (рис. 3, а) имеют значительно меньшую

амплитуду, чем соответствующие средние значения ЭДМ. Средние значения ЭДМ в воде приблизительно пропорциональны количеству N аминокислотных групп молекулы. Этот факт указывает, по-видимому, на более вероятное и стабильное долговременное существование исходных спиральных пространственных, или конформационных состояний олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в воде, где стягивающие молекулу собственные электрические поля (водородные связи $O \cdots H$) ослаблены из-за увеличенной относительной диэлектрической проницаемости среды. Поэтому размер молекулы в спиральном состоянии определяется в большей степени количеством входящих групп, а не сжатием структуры. Такая гипотеза не противоречит имеющимся в литературе данным и может быть в дальнейшем уточнена путем анализа динамических реализаций ЭДМ для разных диапазонов частот колебаний.

Значения ЭДМ в вакууме (рис. 3, б), по сравнению с водной средой (рис. 3, а), приблизительно на порядок меньше, что можно связать с действием собственного электрического поля, усиленного в вакууме из-за снижения относительной диэлектрической проницаемости среды и стягиваю-

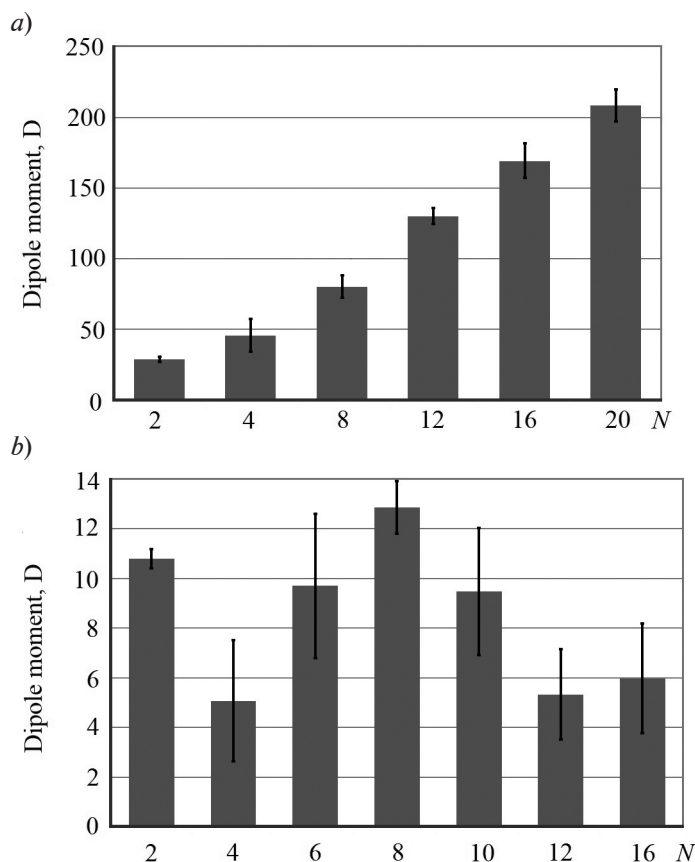


Рис. 3. Гистограммы средних значений ЭДМ с соответствующими среднеквадратичными отклонениями для молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в нулевом электростатическом поле при $T = 300$ К в водной среде (a) и в вакууме (b)

щего молекулу в более плотную структуру.

Значения среднего ЭДМ сопоставимых молекул для водной среды и вакуума (см. рис. 3) не только сильно различаются между собой, но и имеют различные функциональные зависимости от параметра N . В вакууме наблюдается немонотонная зависимость от N , что указывает на более сложный характер формирования сжатой конформационной структуры, определяющей значение интегрального ЭДМ. Видно, например, что наименьшая молекула ряда — Ala_2 — имеет более высокое среднее значение ЭДМ, чем можно получить простой экстраполяцией графика, а наибольшее значение имеет пептид с промежуточным значением параметра $N = 8$. Такой сценарий согласуется с имеющимися данными литературы и дополняет их [3, 4, 6]. Ala_2 на-

ходится в альфа-подобной конформации, а остальные молекулы «сжимаются» сильнее. По графику данных для воды видно, что все олигопептиды аланина распределены по порядку нарастания ЭДМ и сохраняют стартовую структуру альфа-спирали.

Полученные сценарии были подтверждены моделированием действия внешнего электростатического поля E , направленного вдоль вектора ЭДМ, то есть «растягивающего» молекулу вдоль первичной цепи и тем самым частично компенсирующего действие собственного электрического поля молекулы (рис. 4). Как и ожидалось, при увеличении внешнего поля E от нуля до максимума в 10 ккал/(моль $\cdot \text{\AA} \cdot e$) $\approx 4,34 \cdot 10^9$ В/м, ослабленного в водной среде, происходило небольшое возрастание среднего значения интегрального

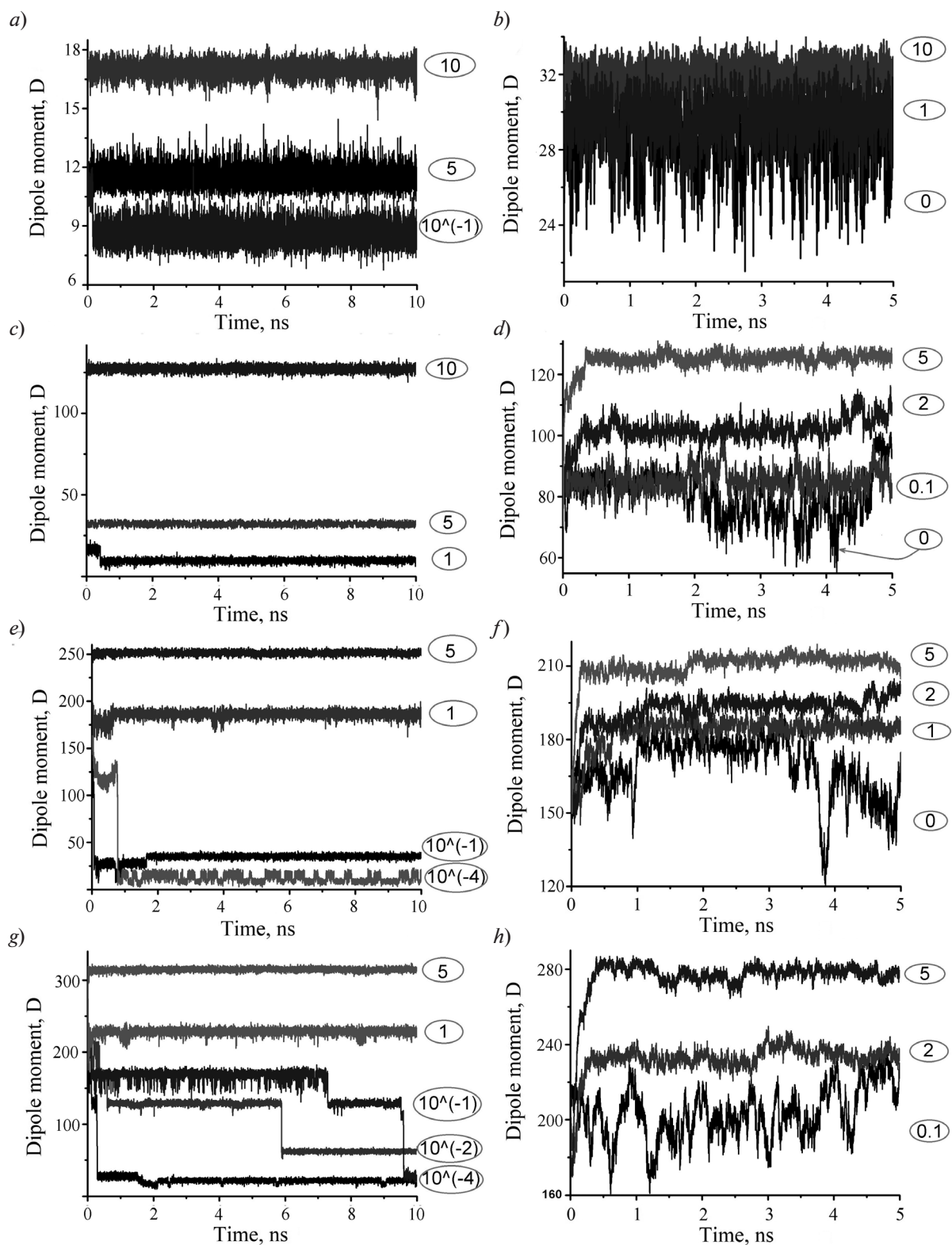


Рис. 4. Графики эволюции ЭДМ молекул Al₂ (a, b), Al₈ (c, d), Al₁₆ (e, f) и Al₂₀ (g, h) в вакууме (a, c, e, g) и воде (b, d, f, h) под действием внешнего электростатического поля E (значения E указаны справа от соответствующих графиков в единицах ккал/(моль · Å · e))

ЭДМ на величину 10 – 50 % от невозмущенного значения, а функциональная зависимость от параметра N оставалась монотонной. Наименьшее относительное возрастание среднего значения интегрального ЭДМ наблюдалось для $N = 2$. В вакууме при увеличении внешнего поля E от нуля до максимума в $4,2 \cdot 10^8$ В/м происходило драматическое возрастание мгновенных значений интегрального ЭДМ в 2 – 30 раз, а зависимость от N становилась более монотонной, поскольку возрастание превалировало для больших значений параметра N .

Влияние изменения температуры при ее увеличении от 200 до 500 К на мгновенное и среднее значения интегрального ЭДМ было значительно слабее, чем действие электрического поля. В водной среде и вакууме возникали более частые быстрые глобаль-

ные пространственные перераспределения, или бифуркации, стимулированные, по-видимому, неустойчивостями структуры. Такие неустойчивости и переходы возможны из-за интенсификации колебаний атомной подсистемы для больших молекул при значениях N выше 12. Они показаны для $N = 8$ и 20 при $T = 200$ К и 500 К в воде (рис. 5, *a* и 5, *c*, соответственно) и для $N = 20$ при $T = 200$ К и 400 К (рис. 5, *d*), а также для $N = 8$ при $T = 200$ К и 450 К в вакууме (рис. 5, *b*).

Выводы

Реализован вычислительный комплекс в виде совокупности пакетов прикладных компьютерных программ, как известных, так и оригинальных. С помощью этого комплекса получены новые данные о состоянии олигопептидов аланина. Ком-

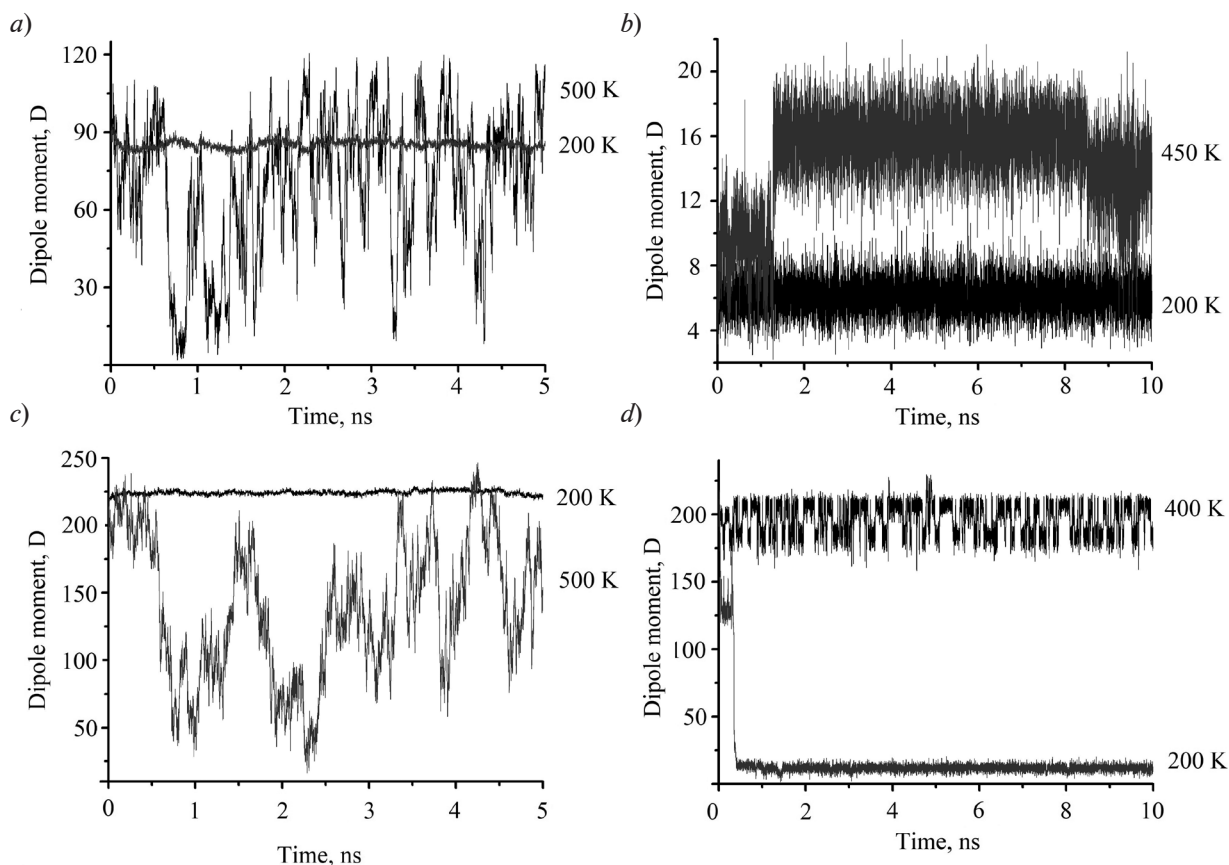


Рис. 5. Типичные временные зависимости ЭДМ молекул Ala_8 (*a*, *b*), и Ala_{20} (*c*, *d*) в водной среде (*a*, *c*) и в вакууме (*b*, *d*), при низком (200 К) и высоких (400 – 500 К) значениях температуры

пьютерное моделирование различных по размеру молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в водной среде и вакууме позволило получить комплекс сведений о наиболее вероятных пространственных структурах и соответствующих значениях интегрального по объему молекулы электрического дипольного момента при определенных варьируемых внешних условиях. Выявленные при моделировании закономерности изменения электрического дипольного момента в различных условиях образовали внутренне непротиворечивый комплекс, физически обоснованный, достоверность которого подтверждается сопоставимостью с известными литературными данными. Это позволило считать разработанный подход и комплекс примененных методик, алгоритмов и программ достаточно надежными и эвристичными. Они по-

ложены в основу дальнейших углубленных исследований. Вычисленные сценарии могут быть использованы для дальнейшего анализа и обобщений конформационной динамики; они позволяют перейти к частотному спектральному анализу динамики электрического дипольного момента. Освоенный программный комплекс пригоден для суперкомпьютерного вычисления более представительных молекулярных сценариев. Выбранные временные параметры моделирования позволят в дальнейшем вычислить частотный спектр, включающий резонансные внутримолекулярные колебания атомной подсистемы.

Данная работа была поддержана средствами программы 5-100-2020 для участия аспирантки Т.И. Зезиной в Школе по методам компьютерного моделирования молекул (2015 год, г. Оденсе, Дания).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Albrieux F., Calvo F., Chirot F., Vorobyev A., Tsybin Yu.O., Lepère V., Antoine R., Lemoine J., Dugourd Ph. Conformation of polyalanine and polyglycine dications in the gas phase: Insight from ion mobility spectrometry and replica-exchange molecular dynamics // *J. Phys. Chem. A*. 2010. Vol. 114. No. 25. Pp. 6888–6896.
2. Leitgeb B., Kerényi Á., Bogár F., Paragi G., Penke B., Rákhely G. Studying the structural properties of polyalanine and polyglutamine peptides // *J. Mol. Model.* 2007. Vol. 13. No. 11. Pp. 1141–1150.
3. Antoine R., Compagnon I., Rayane D., Broyer M., Dugourd Ph., Breaux G., Hagemeister F.C., Pippen D., Hudgins R.R., Jarrold M.F. Electric dipole moments and conformations of isolated peptides // *Europ. Phys. J. D*. 2002. Vol. 20. No. 3. Pp. 583–587.
4. Wang H., Schütte Ch., Ciccotti G., Delle Site L. Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation // *J. Chem. Theory and Comp.* 2014. Vol. 10. No. 4. Pp. 1376–1386.
5. Poulain P., Antoine R., Broyer M., Dugourd P. Monte Carlo simulations of flexible molecules in a static electric field: electric dipole and conformation // *Chem. Phys. Lett.* 2005. Vol. 401. No. 1–3. Pp. 1–6.
6. Calvo F., Dugourd P. Folding of gas-phase polyalanines in a static electric field: alignment, deformations, and polarization effects // *Biophys. J.* 2008. Vol. 95. No. 1. Pp. 18–32.
7. Bulthuis J., Becker J.A., Moro R., Kresin V.V. Orientation of dipole molecule and clusters upon adiabatic entry into an external electric field // *J. Chem. Phys.* 2008. Vol. 129. No. 2. P. 024101.
8. Solomentsev G.Y., English N.J., Mooney D.A. Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide // *J. Comp. Chem.* 2012. Vol. 33. No. 9. Pp. 917–923.
9. Kelly C.M., Northey T., Ryana K., Brooksd B.R., Kholkin A.L., Rodriguez B.J., Buchete N.V. Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field // *Biophys. Chem.* 2015. Vol. 196. Pp. 16–24.
10. Величко Е.Н., Черемискина А.В., Зезина Т.И., Цыбин О.Ю. Импедансная радиоспектроскопия и компьютерное моделирование биомолекулярных пленок // Матер. XXI Междунар. науч.-метод. конф. «Высокие интеллектуальные технологии и инновации в национальных исследовательских университетах». СПб., 5–7 июня 2014. Т. 3. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. С. 50–53.
11. Velichko E., Zezina T., Cheremiskina A., Tsybin O. Nanocommunication device with embedded molecular films: Effect of electromagnetic field and dipole moment dynamics // *Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems; ruSMART-2015. Lecture Notes in Computer Science*. Springer International Publishing, 2015. No. 9247. Pp. 765–771.



12. Зезина Т.И., Цыбин О.Ю. Компьютерное моделирование эволюции дипольного момента пептидов аланина // Научный форум с междунар. участием «Неделя науки СПбПУ». Матер. науч.-практ. конф. Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций СПбПУ. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2015. С. 199–201.

13. Величко Е.Н., Цыбин О.Ю. Биомолекулярная электроника. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. 256 с.

14. Rakos B. Modeling of dipole-dipole coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures // International Journal of Circuit Theory and Applications. 2015. Vol. 43. No. 1. Pp. 60–72.

15. Hanwell M.D., Curtis D.E., Lonie D.C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G.R.

Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform // Journal of Cheminformatics. 2012. Vol. 4. No. 1. Pp. 1–17.

16. MacKerell A.D., Feig M., Brooks C.L. Extending the treatment of backbone energetics in protein force fields: Limitations of gas-phase quantum mechanics in reproducing protein conformational distributions in molecular dynamics simulations // J. Comp. Chem. 2004. Vol. 25. No. 11. Pp. 1400–1415.

17. Phillips J.C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot Ch., Skeel R.D., Kalé L., Schulten K. Scalable molecular dynamics with NAMD // J. Comp. Chem. 2005. Vol. 26. No. 16. Pp. 1781–1802.

18. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD – Visual Molecular Dynamics // J. Mol. Graph. 1996. Vol. 14. No. 1. Pp. 33–38.

Статья поступила в редакцию 28.03.2016, принята к публикации 05.07.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗЕЗИНА Татьяна Игоревна — аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

zezinat@yandex.ru

ЦЫБИН Олег Юрьевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

otsybin@rphf.spbstu.ru

REFERENCES

[1] F. Albrieux, F. Calvo, F. Chirot, et al., Conformation of polyalanine and polyglycine dications in the gas phase: Insight from ion mobility spectrometry and replica-exchange molecular dynamics, J. Phys. Chem. A. 114 (25) (2010) 6888–6896.

[2] B. Leitgeb, Á. Kerényi, F. Bogár, et al., Studying the structural properties of polyalanine and polyglutamine peptides, J. Mol. Model. 13(11) (2007) 1141–1150.

[3] R. Antoine, I. Compagnon, D. Rayane, et al., Electric dipole moments and conformations of isolated peptides, Europ. Phys. J. D. 20(3) (2002) 583–587.

[4] H. Wang, Ch. Schütte, G. Ciccotti, L. Delle Site, Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation, J. Chem. Theory and Comp. 10(4) (2014) 1376–1386.

[5] P. Poulain, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd, Monte Carlo simulations of flexible

molecules in a static electric field: electric dipole and conformation, Chem. Phys. Lett. 401(1–3) (2005) 1–6.

[6] F. Calvo, P. Dugourd, Folding of gas-phase polyalanines in a static electric field: Alignment, deformations, and polarization effects, Biophys. J. 95(1) (2008) 18–32.

[7] J. Bulthuis, J.A. Becker, R. Moro, V.V. Kresin, Orientation of dipole molecule and clusters upon adiabatic entry into an external electric field, J. Chem. Phys. 129(2) (2008) 024101.

[8] G.Y. Solomentsev, N.J. English, D.A. Mooney, Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide, J. Comp. Chem. 33(9) (2012) 917–923.

[9] C.M. Kellya, T. Northeya, K. Ryana, et al., Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field, Biophys. Chem. 196 (2015) 16–24.

[10] E.N. Velichko, A.V. Cheremiskina, T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin, Impedansnaya

radiospektroskopiya i kompyuternoye modelirovaniye biomolekulyarnykh plenok [Impedance spectroscopy and simulation of biomolecular films], *Materialy XXI Mezhdunarodnoy nauchno-metodicheskoy konferentsii «Vysokiye intellektualnyye tekhnologii i innovatsii v natsionalnykh issledovatel'skikh universitetakh»* [Proceedings of the 21-th Intern. Conf. "Smart High Tech. and Innovations at National Research Universities"], Vol. 3, 2014, June 5–7, St. Petersburg, Politekh. Univ. Publ. House, 2014. Pp. 50–53.

[11] **E. Velichko, T. Zezina, A. Cheremiskina, O. Tsybin**, Nanocommunication device with embedded molecular films: Effect of electromagnetic field and dipole moment dynamics, *Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems, ruSMART-2015. Lecture Notes in Computer Science*, Springer International Publishing. 9247 (2015) 765–771.

[12] **T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin**, Kompyuternoye modelirovaniye evolyutsii dipolnogo momenta peptidov alanina [Simulation of evolution of a dipole moment of polyalanine peptides], *Proceedings of the Intern. Conf. "The Week of Science at St. Petersburg Polytechnical University"* ("Nedelya nauki SPbPU"), St. Petersburg, Petersburg,

Politekh. Univ. Publ. House, 2015. Pp. 199–201.

[13] **E.N. Velichko, O.Yu. Tsybin**, *Biomolekulyarnaya elektronika. Vvedeniye* [Biomolecular electronics. Introduction], St. Petersburg Polytechnic university, St. Petersburg, 2011.

[14] **B. Rakos**, Modeling of dipole-dipole coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures, *International Journal of Circuit Theory and Applications*. 43(1) (2015) 60–72.

[15] **M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, et al.**, Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform, *Journal of Cheminformatics*. 4(1) (2012) 1–17.

[16] **A.D. MacKerell, M. Feig, C.L. Brooks**, Extending the treatment of backbone energetics in protein force fields: Limitations of gas-phase quantum mechanics in reproducing protein conformational distributions in molecular dynamics simulations, *J. Comp. Chem.* 25(11) (2004) 1400–1415.

[17] **J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, et al.**, Scalable molecular dynamics with NAMD, *J. Comp. Chem.* 26(16) (2005) 1781–1802.

[18] **W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten**, VMD – Visual Molecular Dynamics, *J. Mol. Graph.* 14(1) (1996) 33–38.

Received 28.03.2016, accepted 05.07.2017.

THE AUTHORS

ZEZINA Tatiana I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

zezinat@yandex.ru

TSYBIN Oleg Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

otsybin@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.10409

УДК 530.145

ОБРАЗОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ ПРИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ИМПУЛЬСОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

**С.Ю. Овчинников¹, Н.В. Ларионов²,
А.А. Смирновский^{1,2}, А.А. Шмидт¹**

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Проведено численное и аналитическое исследование пространственно-временной эволюции квантовой системы, образованной в результате взаимодействия электромагнитного поля с водородоподобным атомом в двумерном приближении. Характерной особенностью полученного решения является наличие особых точек (квантовых вихрей), анализ которых проведен путем введения плотности вероятности и плотности потока вероятности. Образующиеся в процессе ионизации вихри могут распространяться на макроскопические расстояния и проявляться в виде запрещенных областей в спектре волновых чисел. Для численного моделирования такой задачи используется специальное преобразование переменных — метод расширяющегося пространства. Проведен численный анализ зависимости количества квантовых вихрей и их положений от параметров электромагнитного импульса. Численное решение сравнивается с аналитическим, полученным в рамках борновского приближения.

Ключевые слова: квантовый вихрь; ионизация атома; уравнение Шрёдингера; численное моделирование; борновское приближение

Ссылка при цитировании: Овчинников С.Ю., Ларионов Н.В., Смирновский А.А., Шмидт А.А. Образование квантовых вихрей при ионизации атома импульсом электромагнитного поля // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 111–123. DOI: 10.18721/JPM.10409

FORMATION OF QUANTUM VORTICES UPON ATOM IONIZATION BY A PULSE OF ELECTROMAGNETIC WAVES

**S.Yu. Ovchinnikov¹, N.V. Larionov²,
A.A. Smirnovsky^{1,2}, A.A. Schmidt¹**

¹Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation;

²Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

A numerical and analytical study of the space-time evolution of a quantum system formed as a result of the interaction of an electromagnetic pulse with a hydrogen-like atom in the two-dimensional approximation has been carried out. A characteristic

feature of the obtained solution is the presence of singular points, the analysis of them was carried out through a probability density and a probability flux density. The vortices formed during the ionization can propagate to macroscopic distances and manifest themselves as forbidden domains in the spectrum of wave numbers. For numerical simulation of such a problem, a special transformation of variables (method of expanding space) was used. The numerical analysis of the quantum vortices number and its position was performed depending on electromagnetic field parameters. The numerical solution was compared with the analytical one obtained in the framework of the Born approximation.

Key words: quantum vortex; atom ionization; Shrödinger equation; numerical simulation; Born approximation

Citation: S.Yu. Ovchinnikov, N.V. Larionov, A.A. Smirnovsky, A.A. Schmidt, Formation of quantum vortices upon atom ionization by a pulse of electromagnetic waves, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 111–123. DOI: 10.18721/JPM.10409

Введение

Многочисленные исследования указывают на наличие в квантовых системах образований, которые могут трактоваться как вихри [1 – 6]. Недавно была обнаружена вихреподобная структура в конденсате Бозе – Эйнштейна, возникающая при воздействии на него лазерным оптическим излучением [1]. Эта структура аналогична хорошо известной в гидродинамике вихревой дорожке Кармана [7]. Есть основания считать, что при определенных воздействиях аналогичные структуры могут появляться и в простых одноэлектронных квантовых системах. В частности, в работах [5, 6] отмечается возникновение в распределениях плотности вероятности вихреподобных структур, которые соответствуют изолированным нулям волновой функции.

Вихревые структуры могут наблюдаться и в экспериментах как локальные (запрещенные) области, в которых электроны не могут быть обнаружены. Знание о распределении этих вихрей и их траекторий в пространстве координат и импульсов представляет несомненный интерес при исследовании фундаментальных проблем эволюции квантовых систем, а также для решения прикладных задач.

Анализ возникновения вихрей и их эволюции удобно проводить на примере хорошо известной задачи об ионизации атома водорода при воздействии на него кратковременного импульса лазерного излучения. Существующие приближенные подходы к решению таких задач, (см., например, ра-

боты [10, 11]), как правило, не позволяют проводить анализ возникающих вихревых структур и особенностей их эволюции. В решениях, получаемых в рамках квазиклассических подходов, вихревые структуры отсутствуют, поскольку их появление определяется сингулярностью квантового давления, которое отбрасывается в силу малости величины $\hbar^2$.

Тем не менее, эта информация может быть получена путем решения нестационарного уравнения Шрёдингера [4]. С другой стороны, наглядная интерпретация решения задачи об эволюции квантовых вихрей обеспечивается в рамках гидродинамического представления на основе уравнений Маделунга [8]. Еще одним положительным моментом такого подхода является возможность введения в рассмотрение квантового давления [9], которое, как отмечено выше, определяет траектории вихрей и может служить индикатором эволюции всей квантовой системы. Однако сингулярности, возникающие из-за стремления к нулю плотности вероятности, приводят к проблемам использования уравнений Маделунга в расчетах эволюции этих вихреподобных структур. Природа последних сходна с природой потенциальных вихрей в теории движения невязкой среды [7].

С другой стороны, решение нестационарного уравнения Шрёдингера также сопряжено с определенными трудностями, которые связаны с наличием у волновой функции ионизированного электрона осциллирующего множителя вида



$$\exp\left(i \frac{m}{2\hbar} \frac{r^2}{t}\right)$$

(m , r — масса и координата электрона, t — время), приводящего к расходимости при больших значениях r и t .

Одним из способов устранения этой проблемы является удаление сильно осциллирующих фаз при помощи перехода к расширяющемуся пространству и масштабированию времени [12, 13]. Отметим, что возникающие вихревые структуры могут распространяться в неизменном виде также и на макроскопические расстояния [4], где возможно их детектировать в эксперименте.

В настоящей работе предлагается гибридный подход к анализу динамики квантовых систем, который состоит из двух этапов:

решение нестационарного уравнения Шрёдингера в расширяющемся пространстве, позволяющее получить квантовые вихревые структуры;

гидродинамическая интерпретация с переходом к рассмотрению распределений таких полевых величин, как плотность вероятности, поток плотности вероятности и квантовое давление.

На основе этого гибридного подхода рассматривается ионизация двумерного водородоподобного атома коротким импульсом электромагнитного поля.

Целью исследования является анализ возникновения и эволюции квантовых вихрей. В работе также проводится сравнение данных численного моделирования с аналитическими результатами, полученными в борновском приближении.

Полученная информация может быть полезной при постановке соответствующих экспериментальных исследований.

Постановка задачи

В настоящей работе рассматривается пространственно-временная эволюция квантовой системы, образованной в результате взаимодействия электрического поля с водородоподобным атомом в двумерном приближении. Допущение о двумерности справедливо, в частности, если движе-

ние электрона в атоме некоторым образом ограничено двумя степенями свободы, например, как при движении объектов в полупроводниковой квантовой яме [14, 15].

Кроме того, такая упрощенная постановка задачи хорошо подходит для апробации численного алгоритма и выявления закономерностей возникновения вихревых структур, поскольку в двумерном случае их идентификация не представляет сложности. Отметим, что эволюция квантовой системы в двумерном приближении отражает эволюцию для трехмерного атома водорода, если в качестве заряда ядра брать $1/2$ от заряда электрона.

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \\ \hat{H}_0 = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + U(\mathbf{r}) = \\ = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{1}{2\rho}, \\ \hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \tilde{\mathbf{E}}(t) = -\rho \cos(\varphi) \tilde{E}(t), \end{cases} \quad (1)$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан свободного атома; ρ , φ — полярные координаты; $\hat{V}$ — оператор взаимодействия, в котором $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента атома, $\tilde{\mathbf{E}}(t) = \mathbf{e}_x \tilde{E}(t)$ — внешнее переменное электрическое поле, поляризованное вдоль оси x .

Здесь мы сразу записали Гамильтониан в атомных единицах $\hbar = 1$, $m_e = 1$, $e = 1$, а также (как отмечено выше) выбрали потенциал

$$U = U_C / 2,$$

где $U_C = -1/\rho$ — обычный кулоновский потенциал.

Численный метод

Для описания эволюции рассматриваемой квантовой системы использовался подход, основанный на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера. Используемая расчетная программа состоит из нескольких модулей.

Первый предназначен для численного решения уравнения Шрёдингера в координатном и импульсном представлениях во

время действия электрического поля. При этом для продвижения по времени используется стандартный алгоритм, основанный на вычислении пропагатора волновой функции (метод расщепления оператора, см., например, работу [16]):

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp(-i\hat{H}\Delta t)\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

Данный пропагатор делится на три составляющих, зависящих только от оператора координаты и только от оператора импульса, следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = & \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2}\frac{\Delta t}{2}\right) \times \\ & \times \exp\left[-i\left(U(\mathbf{r}) + \hat{V}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right)\Delta t\right] \times \\ & \times \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2}\frac{\Delta t}{2}\right)\Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Эволюция волновой функции на полушагах $\Delta t/2$ осуществляется в импульсном пространстве, для чего при помощи быстрого преобразования Фурье происходит преобразование волновой функции в импульсное представление. Центральная часть пропагатора вычисляется в координатном представлении на шаг Δt , для чего осуществляется обратное преобразование Фурье.

Второй программный модуль предназначен для преобразования волновой функции, полученной после воздействия внешнего импульса, путем перехода к так называемому расширяющемуся (масштабированному) пространству, при помощи преобразования переменных Соловьёва и Виноградского [17]. Подробно данный метод описан в статье [13]. Отметим, что при указанном преобразовании момент времени $t \rightarrow \infty$ соответствует масштабированному $\tau \rightarrow -0$, при этом кулоновский потенциал обращается в δ -функцию. Это приводит к невозможности численно рассчитать уравнение вплоть до $\tau=0$ и к возрастанию погрешностей расчета вблизи начала координат.

Также стоит отметить, что при $\tau \rightarrow -0$ квадрат модуля преобразованной волновой функции представляет собой распределение по волновым числам, т. е. спектр ио-

низированных электронов (все связанные состояния дискретного спектра коллапсируют). Таким образом можно определить энергетический спектр ионизированных электронов.

Для уменьшения влияния дискретного спектра на решение при расчете в расширяющемся пространстве, а также для сравнения с аналитическими данными, перед преобразованием волновой функции в масштабированное пространство из нее вычиталось несколько первых дискретных уровней. Поскольку в задачах ионизации основной интерес представляет энергетический спектр ионизированных электронов, в представленных ниже расчетах эволюция квантовой системы проводилась до момента времени $\tau = 0,001$ (в атомных единицах); при этом было установлено, что решение уже практически перестает зависеть от масштабированного времени τ .

Результаты расчетов

Численное моделирование эволюции квантовой системы было проведено для следующей временной зависимости импульса электрического поля:

$$\tilde{E}(t) = \begin{cases} E_0 \cos(\omega t), & 0 < t < T, \\ 0, & t > T. \end{cases} \quad (4)$$

Амплитуда поля бралась равной $E_0 = 0,5$, частота $\omega = \pi$, длительность импульса T варьировалась в диапазоне целых чисел от 1 до 9. Таким образом, импульс представляет собой четное или нечетное число полупериодов колебаний.

В начальный момент времени предполагается, что атом находится в основном состоянии с волновой функцией

$$\Psi_{1,0}^{(0)}(\rho) = \sqrt{2/\pi} \exp(-\rho).$$

Численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера осуществлялось при следующих параметрах: расчетная область в координатном пространстве представляет собой квадрат размером 60×60 (а.е.)², покрытый равномерной структурированной сеткой размером 2048×2048 ячеек; шаг по времени равен $\Delta t = 10^{-3}$ а.е. Такие параметры выбирались исходя из предварительного исследования точности получаемого



решения и сеточной сходимости, и обеспечивают приемлемое качество разрешения волновой функции.

Рассмотрим сначала вариант с $T = 4$. На рис. 1, *a* приведено распределение модуля волновой функции

$$|\Psi(x, y, T)| \equiv |\Psi|$$

(шкала логарифмическая) в момент времени окончания действия импульса. Локальные области низких значений $|\Psi|$ (белые «пятна» на рис. 1, *a*) представляют собой вихревые структуры.

На рис. 1, *b* показан увеличенный фрагмент поля $|\Psi|$ с векторами плотности потока вероятности

$$\mathbf{J} = 1 / 2i(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

(на указанном рисунке векторы прорежены в два раза и их длина одинакова для большей наглядности). Видно, что в указанной области наблюдается два вихря, вращающихся в противоположных направлениях. Отметим также наличие вихревой структуры, располагающейся дальше от центра, но хуже разрешаемой из-за крайне малых значений $|\Psi|$ в этой области. Возможно наличие и других вихревых структур, которые не разрешаются на данной сетке. Все эти вихревые структуры с течением времени могут рождаться, перемещаться и аннигилировать друг с другом. На рис. 1, *b* как

раз показан момент возникновения пары вихрей.

Поскольку основной интерес в данной работе представляют те вихревые структуры, которые удаляются от центра системы «на бесконечность» и могут проявляться для непрерывного спектра, в дальнейшем будем рассматривать распределения по импульсам на больших временах, которые получаются при использовании метода расширяющегося пространства при $\tau \rightarrow -0$.

На рис. 2, *a* представлено распределение модуля волновой функции в импульсном представлении:

$$|\Psi(k_x, k_y, t \rightarrow \infty)| \equiv |b|$$

(используется логарифмическая шкала) на больших временах. Здесь отчетливо видно два вихря, расположенных на оси k_y симметрично относительно начала координат; увеличенный фрагмент поля с векторами скорости показан на рис. 2, *b*. Таким образом, в результате ионизации атома импульсом электромагнитного поля возникает пара симметричных вихрей. Отметим также наличие на рис. 2, *b* седловой точки при $k_x = -0,4$, $k_y = 2,2$.

Рассмотрим теперь картины распределения по волновым числам при малых значениях T . На рис. 3 представлено поле $|b|$ для $T = 1$ и 2. Видно, что при $T = 1$ вихре-

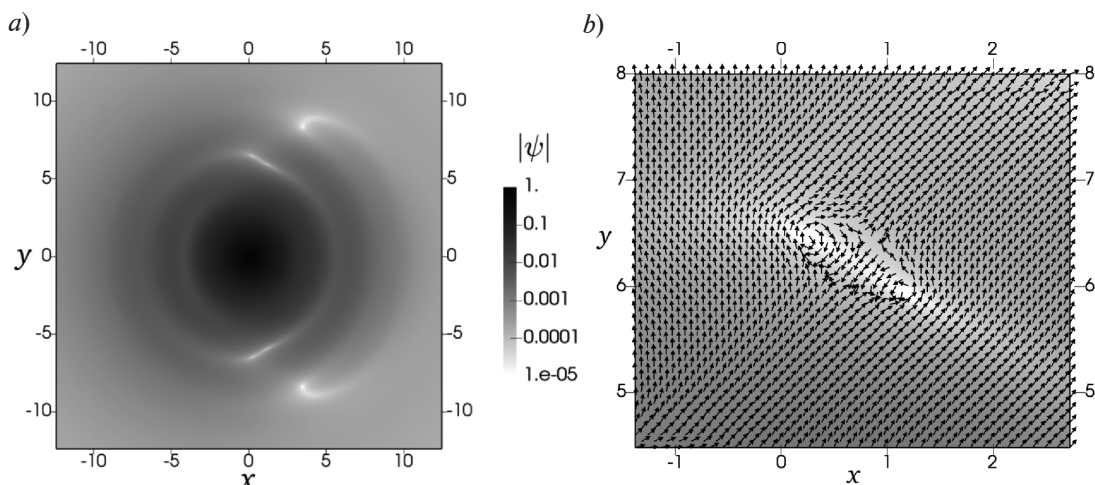


Рис. 1. Расчетное распределение модуля волновой функции $|\Psi(x, y, T)|$ в момент окончания действия импульса (*a*) и его увеличенный фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи вихревой структуры (*b*); показан момент возникновения пары вихрей

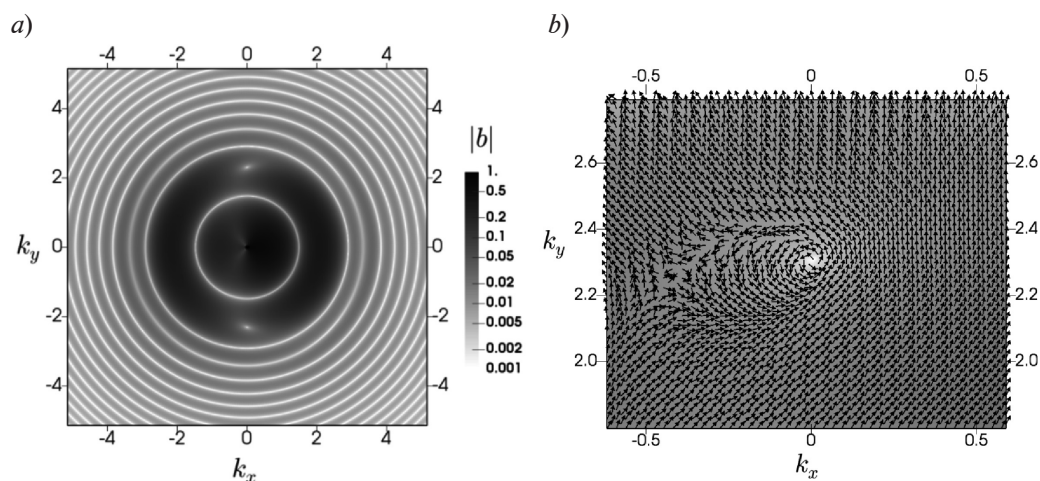


Рис. 2. Распределение модуля волновой функции в импульсном представлении $|\Psi(k_x, k_y, t \rightarrow \infty)| \equiv |b|$ на больших временах (a) и векторы плотности потока вероятности вблизи квантового вихря (b); $T = 4$

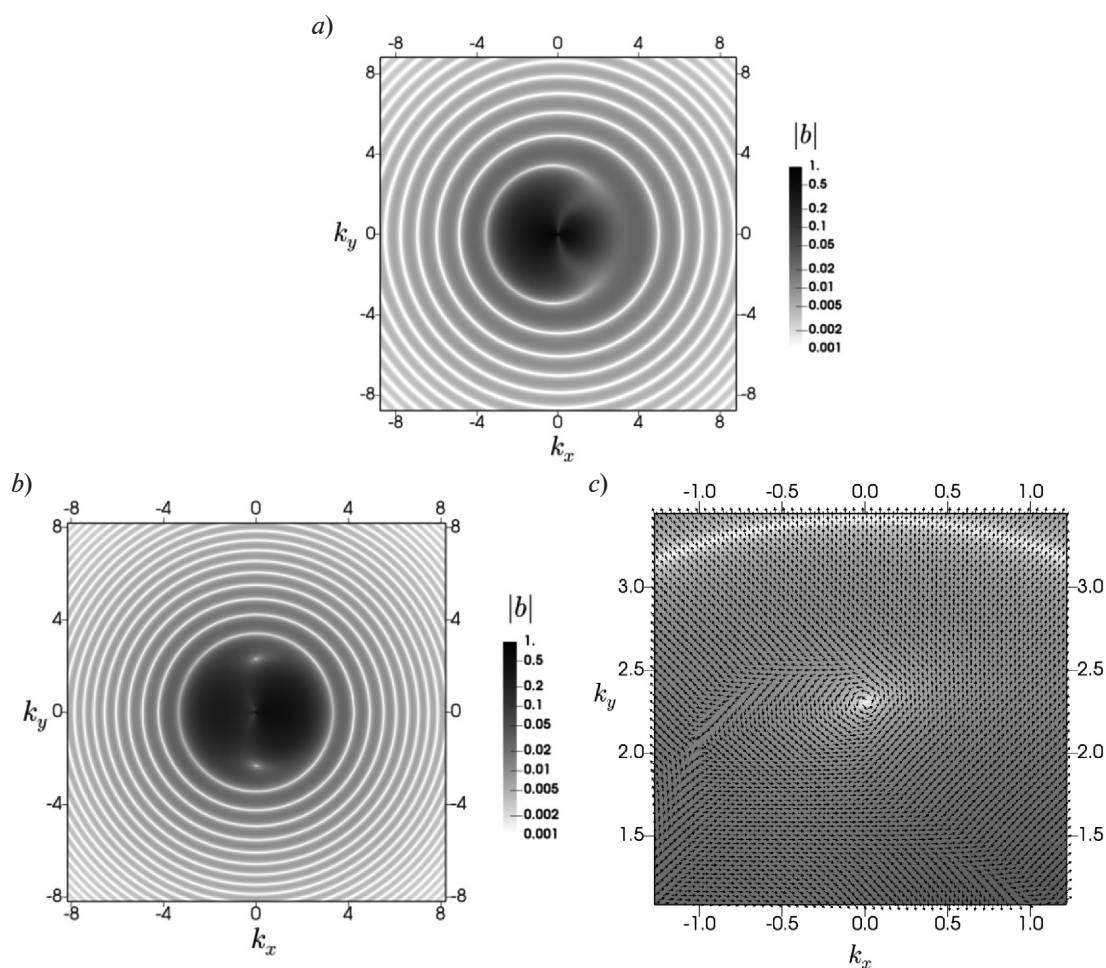


Рис. 3. Зависимости от длительности импульса: распределение $|b|$ при $T = 1$, квантовые вихри не наблюдаются (a); распределение $|b|$ (b) и его увеличенный фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи квантового вихря (c) при $T = 2$ (b, c)



вые структуры отсутствуют (возможно, из-за недостаточного сеточного разрешения), а распределение $|b|$ оказывается сильно несимметричным при малых значениях k_x (см. рис. 3, *a*).

Для увеличенной длительности импульса ($T = 2$) уже явно возникает пара симметрично расположенных вихрей (см. рис. 3, *b*), причем их положение с большой степенью точности соответствует положению вихрей в случае с $T = 4$. Увеличенный фрагмент поля с векторами скорости вблизи вихря показан на рис. 3, *c*. Видно, что вихрь с хорошей точностью прописывается на используемой сетке.

Оказывается, что в случае четного числа полупериодов импульсного воздействия (при $T = 2, 4, 6, 8$) пара возникающих вихрей расположена в одной и той же области с координатами $k_x \approx 0$, $k_y \approx \pm 2,3$. При этом других отчетливо различимых вихрей в спектре ионизированного электрона не наблюдается.

Противоположная ситуация имеет место при нечетном числе полупериодов импульсного воздействия (при $T = 3, 5, 7, 9$). Здесь положение четко различимого вихря меняется при изменении T . В качестве иллюстрации на рис. 4 представлены распределение $|b|$ и векторы скорости при $T = 3$. Видно, что образуется несколько вихревых структур, но наилучшим образом разреша-

ется только та пара, которая расположена ближе к началу координат. Отметим, что координаты положения вихря при увеличении T приближаются к началу координат.

На рис. 5 приведены графики распределений

$$|\Psi(k_x, k_y = 0, t \rightarrow \infty)| \equiv |b(k_x)|$$

для нескольких значений T . Отметим, что при увеличении T начинает формироваться узкий пик, соответствующий резонансной ионизации при $T \rightarrow \infty$, центрированный на значении

$$k_x = \pm \sqrt{2(\omega + E_1)} \approx \pm 2,3,$$

где $E_1 = -0,5$ — энергия основного состояния атома водорода.

В распределении $|b(k_x)|$ относительно начала координат, при нечетных T наблюдается явная несимметричность пиков при $k_x \approx \pm 2,3$, тогда как при $T = 8$ высота этих пиков почти одинакова. Здесь также следует отметить, что в связи с особенностями метода расчета в расширяющемся пространстве (в частности, из-за стремления кулоновского потенциала к δ -функции) численный расчет дает осцилляции и резкое возрастание величины $|b(k_x)|$ при $k_x \rightarrow 0$.

Численный расчет на основе нестационарного уравнения Шрёдингера включает в себя весь спектр процессов в эволюции ис-

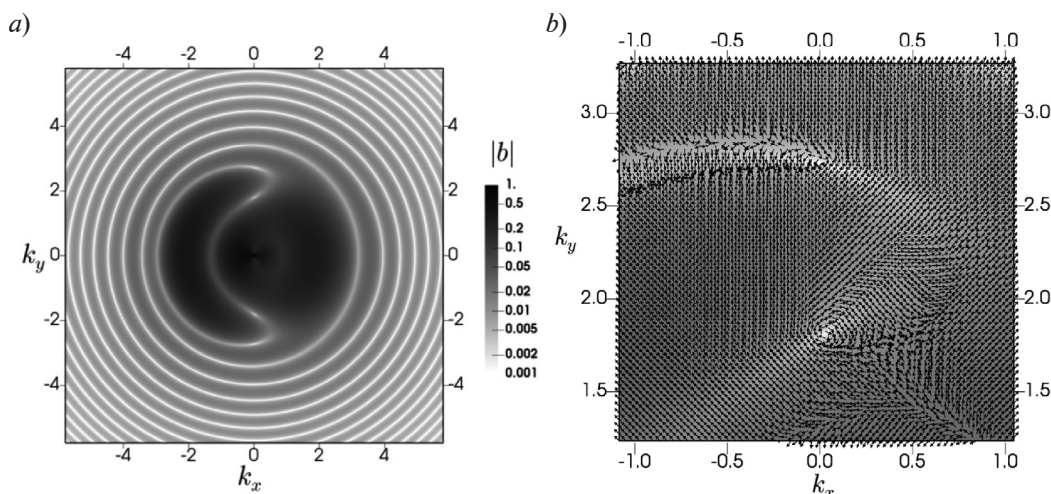


Рис. 4. Распределение $|b|$ (*a*) и фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи двух вихрей (*b*) в импульсном пространстве при нечетном числе полупериодов действия импульса ($T = 3$)

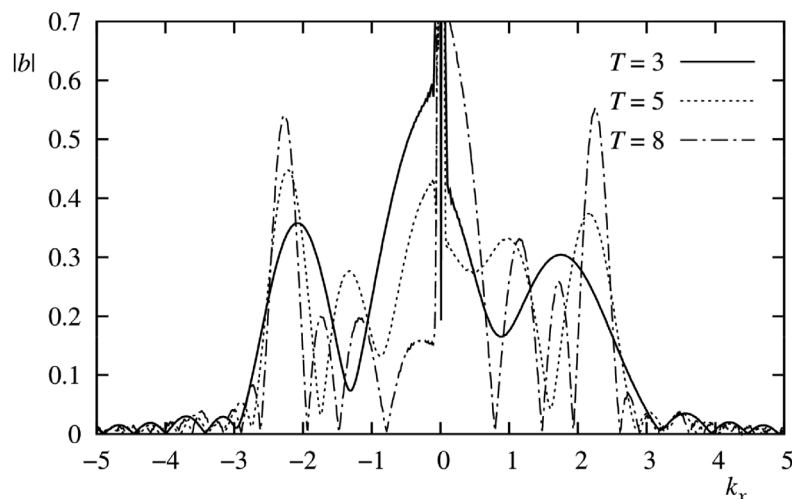


Рис. 5. Зависимость распределения $|b(k_x)|$ от длительности импульса

следуемой квантовой системы, но не всегда позволяет выявить физические механизмы рассматриваемых явлений. В этой связи особый интерес представляет отыскание приближенных аналитических решений задачи, позволяющих получить наглядную физическую интерпретацию процесса. В данной работе оценивается применимость борновского приближения к решению рассматриваемой задачи.

Решение нестационарного уравнения Шрёдингера представим в виде разложения по собственным волновым функциям $\Psi^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана [14]:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n,m} a_{n,m}(t) e^{-iE_n t} \Psi_{n,m}^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_m \int_0^\infty b_{E,m}(t) e^{-iEt} \Psi_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) dE, \quad (5)$$

где $\Psi_{n,m}^{(0)}$ — волновая функция дискретного спектра; $n = 1, 2, \dots$ — главное квантовое число; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(n-1)$ — магнитное квантовое число; энергия дискретного спектра:

$$E_n = -\frac{1}{8(n-1/2)^2};$$

$\Psi_{E,m}^{(0)}$ — волновая функция непрерывного спектра (кулоновская волна) и соответствующая энергия

$$E = k^2 / 2 = E_x + E_y = (k_x^2 + k_y^2) / 2, \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Разлагая амплитуды в ряд по степеням малости приложенного возмущения и оставляя только члены до первого порядка включительно, получаем:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_d^{(1)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_c^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \\ = e^{-iE_1 t} \Psi_{1,0}^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_{n,m} a_{n,m;1,0}^{(1)}(t) e^{-iE_n t} \Psi_{n,m}^{(0)}(\mathbf{r}) + \\ + \sum_m \int_0^\infty b_{E,m;1,0}^{(1)}(t) e^{-iEt} \Psi_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) dE, \quad (6)$$

где предполагается, что в начальный момент времени атом находится в основном состоянии (отмечено нижними дополнительными индексами (1,0)); верхние индексы у волновых функций и амплитуд означают порядок малости. Функция $\Psi_d^{(1)}$ соответствует переходу в возбужденное состояние дискретного спектра (второе слагаемое в формуле (6)), а $\Psi_c^{(1)}$ — в возбужденное состояние непрерывного спектра (последнее слагаемое в (6)).

Нас будут интересовать распределения по импульсам $b(k_x, t)$ и $b(k_y, t)$ ионизированного электрона. Для их нахождения запишем $\Psi_c^{(1)}$ в k_x - и k_y -представлениях, при этом заменим кулоновскую волну, стоящую под интегралом, на цилиндрическую волну

$$\tilde{\Psi}_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = J_{|m|}(\sqrt{2E}\rho) \exp(im\phi) / \sqrt{2\pi}$$

(волновая функция свободного электрона).

Получим следующие распределения:



$$\begin{cases} b^{(1)}(k_x, t) = e^{iE_x t} \langle k_x | \Psi_c^{(1)}(t) \rangle = \\ = \sum_m [i \cdot \text{sgn}(k_x)]^{-|m|} b_{E_x, m; 1, 0}^{(1)}(t), \\ b^{(1)}(k_y, t) = e^{iE_y t} \langle k_y | \Psi_c^{(1)}(t) \rangle = \\ = \sum_m [\pm \text{sgn}(k_y)]^{-|m|} b_{E_y, m; 1, 0}^{(1)}(t), \end{cases} \quad (7)$$

где для $b^{(1)}(k_y, t)$ знак плюс относится к случаю $m > 0$, знак минус — к случаю $m < 0$. Вектор $|k_x\rangle$ соответствует состоянию частицы с определенным импульсом и в координатном представлении имеет вид

$$\langle x | k_x \rangle \equiv \varphi_{k_x}(x) = \exp(ik_x x) / \sqrt{2\pi}$$

(аналогично для вектора $|k_y\rangle$).

При получении распределений (7) были использованы следующие свойства и представления функций Бесселя:

$$\int_0^\infty J_m(k\rho) J_m(k'\rho) \rho d\rho = \delta(k - k') / k,$$

$$J_m(x) = (i^m / 2\pi) \int_0^{2\pi} \exp(-ix \cos \varphi + im\varphi) d\varphi, \quad (8)$$

$$J_m(x) = (1 / 2\pi) \int_0^{2\pi} \exp(-ix \sin \varphi + im\varphi) d\varphi.$$

Для нахождения $b_{E, m}^{(1)}(t)$ подставим разложение (6) в уравнение Шрёдингера; по-

лучим следующее выражение:

$$\begin{aligned} b_{E, m; 1, 0}^{(1)}(t) &= -i \int_0^t e^{i\omega_{E1} t'} \langle \tilde{\Psi}_{E, m}^{(0)} | \hat{V} | \Psi_{1, 0}^{(0)} \rangle dt' = \\ &= i(\delta_{m, 1} + \delta_{m, -1}) \cdot \frac{3\sqrt{2E}}{(1 + 2E)^{5/2}} \int_0^t \tilde{E}(t') e^{i\omega_{E1} t'} dt', \end{aligned} \quad (9)$$

где $\omega_{E1} = E - E_1$.

В итоге $b^{(1)}(k_x, t)$ и $b^{(1)}(k_y, t)$ примут следующий, окончательный вид:

$$\begin{cases} b^{(1)}(k_x, t) = \text{sgn}(k_x) \frac{6|k_x|}{(1 + k_x^2)^{5/2}} \times \\ \times \int_0^t \tilde{E}(t') e^{i\omega_{E_x 1} t'} dt', \\ b^{(1)}(k_y, t) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

На рис. 6, для импульса $\tilde{E}(t)$, заданного формулой (4), аналитический результат (10) сравнивается с результатом численного моделирования.

Отметим некоторые наблюдаемые особенности. В области малых волновых чисел ($k_x \approx 0$) численный результат и аналитическое решение сильно расходятся. Это связано с несколькими факторами:

большая «погрешность» численного расчета в этой области. Она вызвана вышеупомянутой спецификой расчета в мас-

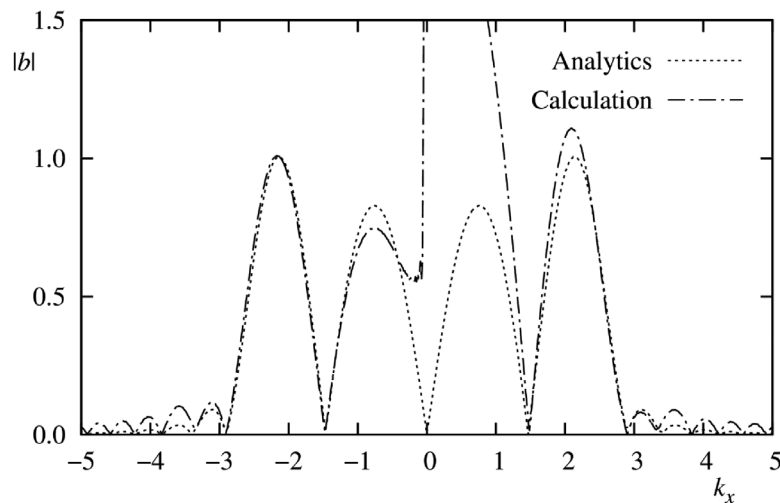


Рис. 6. Сравнение результатов аналитического расчета и численного решения для $|b(k_x)|$ при $T = 4$ (распределения нормированы на левый резонансный пик)

штабированном пространстве, что не позволяет говорить о результате, полученном для малых k_x , как близком к истинному;

известные ограничения борновского приближения, подразумевающего в нашем случае замену кулоновской волны в (5) на цилиндрическую волну.

Тем не менее, в области резонансных значений

$$k_x \approx \pm \sqrt{2(\omega + E_1)}$$

согласие численного расчета и аналитического решения довольно хорошее, хотя борновское приближение и не описывает асимметрию распределения относительно $k_x = 0$. Наличие такой асимметрии вполне естественно (см. также рис. 1), поскольку эволюция волновой функции электрона, изначально находящегося в связанном состоянии, никак не может иметь такую же симметрию, несмотря на «симметричное» действие импульса электрического поля во времени.

Образование вихревых структур, которые можно было бы идентифицировать при анализе распределения $|b(k_y, T)|$, не описывается борновским приближением, так как $|b^{(1)}(k_y, T)| = 0$ (см. формулу (10)).

Таким образом, естественно предположить, что второй порядок теории возмущений, содержащий переходы через промежуточные состояния, позволит выявить вихри, которые, скорее всего, связаны с деструктивной интерференцией таких переходов.

Заключение

Проведены численные исследования пространственно-временной эволюции квантовой системы, образованной в результате взаимодействия импульса электромагнитного поля с водородоподобным атомом в двумерном дипольном приближении. На основе численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера показано, что в процессе воздействия на систему возникают особые точки (изолированные нули волновой функции), которые в гидродинамической интерпретации могут трактоваться как квантовые вихри, идентифицированные нами при анализе пространственного

распределения электронной плотности и плотности потока вероятности для ионизированного электрона.

Путем преобразования переменных и перехода к эволюции в расширяющемся пространстве проанализирована электронная плотность в сопряженном импульсном пространстве, где также возникают вихревые структуры.

Анализ влияния длительности T действия электромагнитного импульса показал, что при $T = 1$ вихревых структур не возникает. При четном количестве полупериодов ($T = 2, 4, 6, 8$) явно идентифицируется один вихрь, положение которого в импульсном пространстве (для случая ионизированного электрона) не зависит от T . При нечетном количестве полупериодов ($T = 3, 5, 7, 9$) центр вихря сдвигается к началу координат с увеличением T и образуются новые вихревые структуры.

Также установлено, что при увеличении длительности импульса T , в распределении $|b(k_x)|$ начинает проявляться узкий резонанс, соответствующий случаю ионизации бесконечно длительным импульсом монохроматического излучения.

Для оценки применимости теории возмущений к рассматриваемой задаче, в борновском приближении были получены аналитические выражения для $b^{(1)}(k_x, t)$ и $b^{(1)}(k_y, t)$ (см. формулу (10)). Решение $b^{(1)}(k_x, T)$ хорошо согласуется с результатом численного расчета, хотя и не описывает естественную асимметрию распределения относительно $k_x = 0$, обусловленную начальным связанным состоянием электрона. В области $k_x \approx 0$ наблюдается сильное расхождение $b^{(1)}(k_x, T)$ с результатом численного расчета, что обусловлено как численными погрешностями в этой области, так и используемыми приближениями при выводе аналитического решения. Для анализа квантовых вихрей необходимо было проанализировать распределение $b^{(1)}(k_y, T)$, которое для данной геометрии ионизации не чувствительно к приложенному возмущению и равно нулю. Этот результат указывает на то, что квантовые вихри образуются посредством



деструктивной интерференции переходов через различные промежуточные состояния дискретного или непрерывного спектров, которые могут быть учтены во втором порядке теории возмущений. Вторым порядком также позволит описать несимметричность распределения $b^{(1)}(k_x, T)$ относительно $k_x = 0$ и, возможно, объяснит зависимость вихрей от длительности импульса.

Более детальное исследование этого вопроса, которое предполагается провести посредством анализа рядов теории возму-

щений, будет изложено нами в отдельной статье.

Благодарности

Авторы выражают искреннюю признательность доцентам кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого С.В. Божокину и К.Ю. Платонову за ценные замечания и обсуждение полученных авторами результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №15-02-07794.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wilson R.M. An obstacle dragged through a Bose–Einstein condensate can leave a well-known pattern of vortices in its wake // *Physics Today*. 2017. Vol. 70. No. 1. P. 19. <http://dx.doi.org/10.1063/PT.3.3416>
2. Krstulovic G., Brachet N., Tirapegui E. Radiation and vortex dynamics in the nonlinear Schrödinger equation // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. No. 2. P. 026601.
3. Ngoko Djikap J.M., Meremianin A.V., Manakov N.L., Hu S.X., Madsen L.B., Starace A.F. Multistart spiral electron vortices in ionization by circularly polarized UV pulses // *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 94. No. 1. P. 013408.
4. Ovchinnikov S.Y., Macek J.H., Schultz D.R. Hydrodynamical interpretation of angular momentum and energy transfer in atomic processes // *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 90. No. 6. P. 062713.
5. Ngoko Djikap J.M., Hu S.X., Madsen L.B., Manakov N.L., Meremianin A.V., Starace A.F. Electron vortices in photoionization by circularly polarized attosecond pulses // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. No. 11. P. 113004.
6. Schmidt L.Ph.H., Goihl C., Metz D., Schmidt-Böcking H., Dörner R., Ovchinnikov S.Yu., Macek J.H., Schultz D.R. Vortices associated with the wavefunction of a single electron emitted in slow ion-atom collisions // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. No. 8. P. 083201.
7. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 600 с.
8. Madelung E. Quantentheorie in hydrodynamischer Form // *Z. Physik*. 1926. Vol. 40. Pp. 332–326.
9. Takabayashi T. On the formulation of quantum mechanics associated with classical pictures // *Prog. Theor. Phys.* 1952. Vol. 8. No. 2. Pp. 143–182.
10. Федоров М.В. Работа Л.В. Келдыша «Ионизация в поле сильной электромагнитной волны» и современная физика взаимодействия атомов с сильным лазерным полем // *ЖЭТФ*. 2016. Т. 149. Вып. 3. С. 522–529.
11. Делоне Н.Б., Крайнев В.П. Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. М.: Физматлит, 2001. 320 с.
12. Ovchinnikov S.Yu., Ogurtsov G.N., Macek J.H., Gordeev Yu.S. Dynamics of ionization in atomic collisions // *Phys. Rep.* 2004. Vol. 389. No. 3. Pp. 119–159.
13. Овчинников С.Ю., Смирновский А.А., Шмидт А.А. Разработка алгоритма гидродинамического анализа эволюции квантовых систем в расширяющемся пространстве // *Письма в ЖТФ*. 2016. Т. 42. № 8. С. 37–44.
14. Yang X.L., S.H. Guo, F.T. Chan, K.W. Wong, W.Y. Ching. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory // *Phys. Rev. A*. 1991. Vol. 43. No. 3. Pp. 1186–1196.
15. Parfitt D.G.W., Portnoi M.E. The two-dimensional hydrogen atom revisited // *Journal of Mathematical Physics*. 2002. Vol. 43. No. 10. Pp. 4681–4691.
16. Bandrauk A.D., Shen H. Higher order exponential split operator method for solving time-dependent Schrödinger equations // *Canadian Journal of Chemistry*. 1992. Vol. 70. No. 2. Pp. 555–559.
17. Soloviev E.A., Vinitsky S.I. Suitable coordinates for the three-body problem in the adiabatic representation // *Journal of Physics. B*. 1985. Vol. 18. No. 16. Pp. L557–L562.

Статья поступила в редакцию 21.09.2017, принята к публикации 18.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ОВЧИННИКОВ Сергей Юрьевич — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
sovichin@utk.edu

ЛАРИОНОВ Николай Владимирович — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
larionov.nickolay@gmail.com

СМИРНОВСКИЙ Александр Андреевич — кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

ШМИДТ Александр Александрович — кандидат физико-математических наук, заведующий сектором Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

- [1] R.M. Wilson, An obstacle dragged through a Bose–Einstein condensate can leave a well-known pattern of vortices in its wake, *Physics Today*. 70 (1) (2017) 19, <http://dx.doi.org/10.1063/PT.3.3416>
- [2] G. Krstulovic, N. Brachet, E. Tirapegui, Radiation and vortex dynamics in the nonlinear Schrödinger equation, *Phys. Rev. E*. 78 (2) (2008) 026601.
- [3] J.M. Ngoko Djiokap, A.V. Meremianin, et al., Multistart spiral electron vortices in ionization by circularly polarized UV pulses, *Phys. Rev. A*. 94 (1) (2016) 013408.
- [4] S.Y. Ovchinnikov, J.H. Macek, D.R. Schultz, Hydrodynamical interpretation of angular momentum and energy transfer in atomic processes, *Phys. Rev. A*. 90 (6) (2014) 062713.
- [5] J.M. Ngoko Djiokap, S.X. Hu, L.B. Madsen, et al., Electron vortices in photoionization by circularly polarized attosecond pulses, *Phys. Rev. Lett.* 115 (11) (2015) 113004.
- [6] L.Ph.H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz, et al., Vortices associated with the wavefunction of a single electron emitted in slow ion-atom collisions, *Phys. Rev. Lett.* 112 (8) (2014) 083201.
- [7] L.G. Loitsyanskiy, *Mechanics of liquids and gases*, New York, Begell House, 1995.
- [8] E. Madelung, Quantentheorie in hydrodynamischer Form, *Z. Physik*. 40 (1926) 332–326.
- [9] T. Takabayasi, On the formulation of quantum mechanics associated with classical pictures, *Prog. Theor. Phys.* 8 (2) (1952) 143–182.
- [10] M.V. Fedorov, L.V. Keldysh’s “Ionization in the field of a strong electromagnetic wave” and modern physics of interaction of atoms with a strong laser field, *JETP*. 2016, 122 (3) (2016) 449–455.
- [11] N.B. Delone, V.P. Krainev, *Nelineynaya ionizatsiya atomov lazernym izlucheniem* [Nonlinear ionization of atoms by laser radiation], Moscow, Physmatlit, 2001.
- [12] S.Yu. Ovchinnikov, G.N. Ogurtsov, J.H. Macek, Yu.S. Gordeev, Dynamics of ionization in atomic collisions, *Phys. Rep.* 389 (3) (2004) 119–159.
- [13] S.Yu. Ovchinnikov, A.A. Smirnovsky, A.A. Schmidt, Development of an algorithm of hydrodynamic analysis of quantum system evolution in expanding space, *Tech. Phys. Lett.* 42 (4) (2016) 407–410.
- [14] X.L. Yang, S.H. Guo, F.T. Chan, et al., Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory, *Phys. Rev. A*. 43 (3) (1991) 1186–1196.
- [15] D.G.W. Parfitt, M.E. Portnoi, The two-dimensional hydrogen atom revisited, *Journal of Mathematical Physics*. 43 (10) (2002) 4681–4691.
- [16] A.D. Bandrauk, H. Shen, Higher order exponential split operator method for solving time-



dependent Schrödinger equations, Canadian Journal of Chemistry. 70 (2) (1992) 555–559.

[17] E.A. Soloviev, S.I. Vinitsky, Suitable

coordinates for the three-body problem in the adiabatic representation, Journal of Physics. B. 18 (16) (1985) L557– L562.

Received 21.09.2017, accepted 18.10.2017.

THE AUTHORS

OVCHINNIKOV Sergey Yu.

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation.
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
sovichin@utk.edu

LARIONOV Nikolay V.

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

SMIRNOVSKY Alexander A.

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

SCHMIDT Alexander A.

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation.
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru

DOI: 10.18721/JPM.10410

UDC 530.12:531.51

ON THE SOLUTIONS OF FIELD EQUATIONS DUE TO ROTATING BODIES IN GENERAL RELATIVITY

V. Kumar¹, L. Kaur²

¹DAV College Pundri Haryana, India;

²Jaypee Institute of Information Technology, Noida, India.

A metric, describing the field due to bodies in stationary rotation about their axes and compatible with a stationary electromagnetic field, has been studied in the present paper. Using the Lie symmetry reduction approach, we have herein examined, under continuous groups of transformations, the invariance of field equations due to rotation in General Relativity, which are expressed in terms of a coupled system of partial differential equations. We have exploited the symmetries of these equations to derive some ansatz leading to the reduction of variables, where the analytic solutions are easier to obtain by considering the optimal system of conjugacy inequivalent subgroups. Furthermore, some solutions are considered by using numerical methods due to complexity of reduced ordinary differential equations.

Key words: General Relativity, electromagnetic field, Lie symmetry method, exact solution

Citation: V. Kumar, L. Kaur, On the solutions of field equations due to rotating bodies in General Relativity, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 124–133. DOI: 10.18721/JPM.10410

О РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ ГРАВИТАЦИОННОГО ПОЛЯ, СОЗДАННОГО ВРАЩАЮЩИМИСЯ ТЕЛАМИ, В ОБЩЕЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

В. Кумар¹, Л. Каур²

¹Колледж Дайянанд англо-ведической (DAV) системы образования,
г. Пандри (Харьяна), г. Пандри, Индия;

²Институт информационных технологий Джепи, г. Нойда, Индия

Изучена метрика, которая описывает гравитационное поле, создаваемое телами при стационарном вращении вокруг своих осей, совместимая со стационарным электромагнитным полем. При этом, используя метод понижения симметрии групп Ли, мы изучили инвариантность (относительно непрерывных групп преобразований) уравнений поля, вызванного вращением, в общей теории относительности. Преобразования приводят к связанной системе дифференциальных уравнений с частными производными. Мы воспользовались симметрией этих уравнений, для того чтобы достичь некоторых упрощений, приводящих к сокращению числа переменных, когда аналитические решения легче получить, если рассмотреть оптимальную систему сопряженных неэквивалентных подгрупп. Кроме того, часть решений получена с применением численных методов, в связи со сложностью обыкновенных дифференциальных уравнений даже сниженного порядка.

Ключевые слова: общая теория относительности; электромагнитное поле; метод понижения симметрии групп Ли; точное решение

Ссылка при цитировании: Кумар В., Каур Л. О решении уравнений гравитационного поля, созданного вращающимися телами, в общей теории относительности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 124–133. DOI: 10.18721/JPM.10410



Introduction

General Relativity describes phenomena on all scales in the Universe, from compact objects such as black holes, neutron stars and supernovae to large-scale structure formations such as those involved in creating the distribution of clusters of galaxies. For many years, physicists, astrophysicists and mathematicians have striven to develop techniques for unlocking the secrets contained in Einstein's theory of gravity. More recently, solutions of Einstein field equations have added their expertise to the endeavor. Those who study these objects face a daunting challenge that the equations are among the most complicated in mathematical physics. Together, they form a set of coupled, nonlinear, hyperbolic-elliptic partial differential equations that contain many thousands of terms.

The gravitational field due to a rotating body was firstly attempted by Thirring who used Einstein field equations in the linear approximation and showed that a rotating thin spherical shell produces near its center forces similar to the Coriolis and centrifugal forces of classical machines. Later on, this work has been revised by Bass and Pirani [1] who supplemented the energy tensor of incoherent material by a term representing the elastic interaction between the particles of the shell. Bach considered the field due to a slowly rotating sphere by successive approximations taking the Schwarzschild solution as his zeroth approximation. Special cases of stationary fields have been considered by Lanczos [2] who applied the results to cosmological problems.

Lewis [3] found the field due to a rotating infinite cylinder and thus obtained two different methods of successive approximations for constructing solutions of a more general type which behave in an assigned manner at infinity and on a surface of revolution enclosing the rotating matter to which the field is due. Clark tried to solve the empty gravitational field equations, using successive approximations, with forms of $g_{\mu\nu}$ appropriate to the gravitational field of a rotating body. This introduction provides a sample of the idea that these equations have been a subject of extensive and intensive study both by mathematicians and physicists. For a de-

tailed study of exact solutions of Einstein field equations, the reader may refer to Stephani et al. [4]. Recent years have been dedicated to studying the field equations of General Relativity for their solutions [5 – 16], these solutions are important in the sense that they represent the physical models in an analytical manner.

In the present paper, we have considered a metric [3] which is supposed to describe the field due to bodies in stationary rotation. Further in this case we furnished a consistent set of partial differential equations for determining $g_{\mu\nu}$ in the empty space-time. It is shown that by using a selective form of $g_{\mu\nu}$, the problem of solving four equations in three unknowns has been reduced to a system of two partial differential equations in two unknowns and then Lie group analysis is applied to generate various symmetries of this coupled system of partial differential equations, which are then used to identify the associated basic vector fields of the optimal system for systematic study of the group invariant solutions admitted by the system.

Nature of field equations

The following metric described the field due to bodies in stationary rotation about their axes

$$ds^2 = -\exp(2\lambda)(d\rho^2 + dz^2) - Cd\phi^2 + Ddt^2 + 2Ed\phi dt, \quad (1)$$

where λ , C , D and E are functions of ρ and z only.

Following Lewis [3], we have made use of canonical coordinates in the sense of Weyl. The choice of these coordinates is possible only in matter free space as it can be easily verified by a procedure similar to that of Synge. Consequently, in domains occupied by matter, the canonical coordinates cannot be used. In canonical coordinates we have

$$CD + E^2 = \rho^2, \quad (2)$$

and therefore the expressions for the Einstein tensor are given by:

$$G_{11} = -G_{22} = -\frac{\lambda_1}{\rho} - \frac{C_1 D_1 + E_1^2 - C_2 D_2 - E_2^2}{4\rho^2}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
 G_{33} &= \exp \frac{(-2\lambda)}{2} \left(-2C(\lambda_{11} + \lambda_{22}) + C_{11} + \right. \\
 &+ C_{22} - \frac{C_1}{\rho} + \frac{3C}{2\rho^2} (C_1 D_1 + E_1^2 + C_2 D_2 + E_2^2) \Big), \\
 G_{44} &= \exp \frac{(-2\lambda)}{2} \left(2D(\lambda_{11} + \lambda_{22}) - D_{11} - \right. \\
 &- D_{22} + \frac{D_1}{\rho} - \frac{3D}{2\rho^2} (C_1 D_1 + E_1^2 + C_2 D_2 + E_2^2) \Big), \\
 G_{34} &= \exp \frac{(-2\lambda)}{2} \left(-2E(\lambda_{11} + \lambda_{22}) - E_{11} - \right. \\
 &- E_{22} + \frac{E_1}{\rho} - \frac{3E}{2\rho^2} (C_1 D_1 + E_1^2 + C_2 D_2 + E_2^2) \Big), \\
 G_{12} &= -\frac{\lambda_2}{\rho} - \frac{C_1 D_2 + 2E_1 E_2 + C_2 D_1}{4\rho^2},
 \end{aligned} \quad (3)$$

where the lower suffixes 1 and 2 after the unknown functions imply partial differentiation with respect to ρ and z respectively.

Now we have considered the determination equation

$$|G_{\mu\nu} - sg_{\mu\nu}| = 0. \quad (4)$$

We found that two of the eigenvalues of $G_{\mu\nu}$ with respect to $g_{\mu\nu}$ are given by

$$s_i = \exp(-2\lambda)(G_{22}^2 + G_{12}^2)^{\frac{1}{2}}, i = 1, 2, \quad (5)$$

and the other two are given by following equation:

$$s^2 + Rs - \frac{1}{\rho^2} = (G_{33}G_{44} - G_{34}^2) = 0 \quad (6)$$

where R is the curvature scalar.

It is clear from Eqs. (5) and (6) that, in general, two eigenvalues of $G_{\mu\nu}$ are equal and opposite while the other two are different. Therefore, metric (1) in canonical coordinates cannot represent a perfect fluid distribution. But if we do not consider the canonical coordinates then all the eigenvalues of the Einstein tensor are different in general. Thus, in this case metric (1) can be utilized to describe the space time in the domains occupied by matter.

In case of an electromagnetic field, we have $R = 0$, therefore, Eq. (6) gives

$$S_j = \pm \frac{1}{\rho} \sqrt{(G_{33}G_{44} - G_{34}^2)}, j = 3, 4. \quad (7)$$

Thus, in this case the other two eigenvalues are equal and opposite. In fact, the eigenvalues are $k, -k, m, -m$, where

$$\begin{aligned}
 k &= \exp(-2\lambda) \sqrt{(G_{22}^2 + G_{12}^2)}, \\
 m &= \frac{1}{\rho} \sqrt{(G_{33}G_{44} - G_{34}^2)},
 \end{aligned} \quad (8)$$

and if we further assume that $k = m$, the eigenvalues become $k, k, -k, -k$, which characterize an electromagnetic field.

The field equations for empty space-time. The field equations, in terms of a coupled system of partial differential equations, for empty space-time, corresponding to Eq. (1) are given by

$$\lambda_{11} + \lambda_{22} - \frac{\lambda_1}{\rho} = \frac{C_1 D_1 + E_1^2}{2\rho^2}, \quad (9)$$

$$\lambda_{11} + \lambda_{22} + \frac{\lambda_1}{\rho} = \frac{C_2 D_2 + E_2^2}{2\rho^2}, \quad (10)$$

$$\lambda_2 = -\frac{1}{4\rho} (C_1 D_2 + C_2 D_1 + E_1^2 + E_2^2), \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
 &C_{11} + C_{22} - \frac{C_1}{\rho} + \frac{C}{\rho^2} \times \\
 &\times (C_1 D_1 + C_2 D_2 + E_1^2 + E_2^2) = 0,
 \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned}
 &D_{11} + D_{22} - \frac{D_1}{\rho} + \frac{D}{\rho^2} \times \\
 &\times (C_1 D_1 + C_2 D_2 + E_1^2 + E_2^2) = 0,
 \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
 &E_{11} + E_{22} - \frac{E_1}{\rho} + \frac{E}{\rho^2} \times \\
 &\times (C_1 D_1 + C_2 D_2 + E_1^2 + E_2^2) = 0.
 \end{aligned} \quad (14)$$

From Eqs. (9) and (10), the condition of integrability can be easily verified for above system of partial differential equations. Also from Eqs. (9) and (10), we obtain

$$\lambda_{11} + \lambda_{22} = \frac{(C_1 D_1 + C_2 D_2 + E_1^2 + E_2^2)}{\rho^2}, \quad (15)$$

$$\lambda_1 = \frac{(-C_1 D_1 + C_2 D_2 - E_1^2 + E_2^2)}{4\rho}. \quad (16)$$

Also Eq. (15) is consistent with Eqs. (11)



and (16). Thus, the problem of solving Eqs. (2), (9) – (14) is reduced to determining C , D and E from (2), (12), (13) and (14) and then λ will be given by Eqs. (11) and (16).

We made the substitutions as follows:

$$\begin{aligned} C &= \rho \exp(-\mu) \cos \theta, D = \rho \exp(\mu) \cos \theta, \\ E &= \rho \sin \theta \end{aligned} \quad (17)$$

where μ and θ are functions of ρ and z .

Consequently, Eqs. (12), (13) and (14) are reduced to

$$\begin{aligned} \cos \theta (\mu_{11} + \mu_{22} + \frac{\mu_1}{\rho} - 2 \tan \theta (\mu_1 \theta_1 + \mu_2 \theta_2)) + \\ + \sin \theta (\theta_{11} + \theta_{22} + \frac{\theta_1}{\rho} - \\ - 2 \sin \theta \cos \theta (\mu_1^2 + \mu_2^2)) = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \cos \theta (\mu_{11} + \mu_{22} + \frac{\mu_1}{\rho} - 2 \tan \theta (\mu_1 \theta_1 + \mu_2 \theta_2)) - \\ - \sin \theta (\theta_{11} + \theta_{22} + \frac{\theta_1}{\rho} - \\ - 2 \sin \theta \cos \theta (\mu_1^2 + \mu_2^2)) = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\theta_{11} + \theta_{22} + \frac{\theta_1}{\rho} - \sin \theta \cos \theta (\mu_1^2 + \mu_2^2) = 0. \quad (20)$$

From Eqs. (18) and (19) we obtain, in view of Eq. (20), the single equation:

$$\mu_{11} + \mu_{22} + \frac{\mu_1}{\rho} - \tan \theta (\mu_1 \theta_1 + \mu_2 \theta_2) = 0, \quad (21)$$

and Eqs. (11) and (16) lead to the following equations:

$$\lambda_1 = -\frac{1}{4\rho} - \frac{\rho}{4} (\theta_1^2 + \theta_2^2 - \cos^2 \theta (\mu_1^2 - \mu_2^2)), \quad (22)$$

$$\lambda_2 = \frac{\rho}{2} (\cos^2 \theta \mu_1 \mu_2 - \theta_1 \theta_2). \quad (23)$$

Thus, the problem of solving four equations in three unknowns has been reduced to a system of partial differential equations consisting of two Eqs. (20) and (21) in two unknowns θ and μ . Also we can determine C , D and E by using the expressions of C , D and E in Eq. (17) and then λ can be determined from Eqs. (22) and (23).

Solutions of field equations

It is well-known that the Lie symmetries,

originally advocated by the Norwegian mathematician Sophus Lie in the beginning of the 19th century, are widely applied to investigate nonlinear differential equations for constructing their exact and explicit solutions. Considering the tangent structural equations under one or several parameter transformation groups is the basic idea of Lie symmetry analysis. It has been shown that Lie symmetry analysis has been effectively used to seek exact and explicit solutions to both ordinary differential equations (ODEs) and partial differential equations (PDEs). There are a lot of papers and many excellent books [15 – 24] devoted to such applications.

In the present section, we have performed Lie group classification of Eqs. (20) and (21). That is, we have furnished all the possible forms of Lie point symmetries, admitted by Eqs. (20) and (21), and then constructed symmetry reductions and group-invariant solutions using the optimal system of subalgebras of the Lie algebras of the equations.

The classical Lie method [18] has been applied to Eqs. (20) and (21) by considering the one-parameter Lie group of infinitesimal transformations in ρ, z, θ, μ , $\xi^1(\rho, z)$, $\xi^2(\rho, z)$, $\eta^1(\rho, z)$ and $\eta^2(\rho, z)$. This transformation leaves invariant the following set:

$$\begin{aligned} S \equiv \{ \theta(\rho, z), \mu(\rho, z): \Delta_1(\theta, \mu) = 0, \\ \Delta_2(\theta, \mu) = 0 \}, \end{aligned} \quad (24)$$

of the solutions of Eqs. (20) and (21), where

$$\Delta_1 = \theta_{11} + \theta_{22} + \frac{\theta_1}{\rho} - \sin \theta \cos \theta (\mu_1^2 + \mu_2^2), \quad (25)$$

$$\Delta_2 = \mu_{11} + \mu_{22} + \frac{\mu_1}{\rho} - \tan \theta (\mu_1 \theta_1 + \mu_2 \theta_2).$$

The associated Lie algebra of infinitesimal symmetries is the set of vector fields of the form

$$\Gamma \equiv \xi^1 \frac{\partial}{\partial \rho} + \xi^2 \frac{\partial}{\partial z} + \eta^1 \frac{\partial}{\partial \theta} + \eta^2 \frac{\partial}{\partial \mu}. \quad (26)$$

The set S_Δ is invariant under the one-parameter transformations provided that

$$\text{Pr}^{(2)}(\Gamma)|_{\Delta=0} = 0,$$

where $\text{Pr}^{(2)}(\Gamma)$ is the second prolongation of the vector field Γ , which is explicitly given in terms

of ξ^1, ξ^2, η^1 and η^2 .

After determining the infinitesimals of Eqs. (20) and (21), the similarity variables are derived by solving invariant surface conditions

$$\begin{aligned}\Phi_1 &\equiv \xi^1 \theta_\rho + \xi^2 \mu_z - \eta^1 = 0, \\ \Phi_2 &\equiv \xi^1 \theta_\rho + \xi^2 \mu_z - \eta^2 = 0.\end{aligned}\quad (27)$$

The symmetries under which Eqs. (20) and (21) are invariant can be spanned by the following three linearly independent infinitesimal generators:

$$\Gamma_1 = \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + z \frac{\partial}{\partial z}, \Gamma_2 = \frac{\partial}{\partial z}, \Gamma_3 = \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (28)$$

It is easy to verify that Γ_1 , Γ_2 and Γ_3 are closed under the Lie bracket. So we can see that the generator of the invariant group Γ of Eqs. (20) and (21) constructs three-dimensional Lie algebra, which is spanned by the basis Γ_1 , Γ_2 and Γ_3 . Thus, we have the corresponding one-parameter group of symmetries of Eqs. (20) and (21):

$$\begin{aligned}G_1 : (\rho, z, \theta, \mu) &\rightarrow (\exp(\epsilon)\rho, (\exp(\epsilon)z, \theta, \mu), \\ G_2 : (\rho, z, \theta, \mu) &\rightarrow (\rho, \exp(\epsilon)z, \theta, \mu), \\ G_3 : (\rho, z, \theta, \mu) &\rightarrow (\rho, z, \exp(\epsilon)\theta, \mu).\end{aligned}\quad (29)$$

We can see that G_1 is a space translation, G_2 is a time translation and G_3 is a scaling transformation. We have used the subalgebraic structure of symmetries (28) to construct an optimal system [19] of one-dimensional subgroups. The optimal system yields only the following symmetry combinations:

$$(i)\Gamma_1 + \beta\Gamma_3, (ii)\Gamma_2 + \alpha\Gamma_3, (iii)\Gamma_3, \quad (30)$$

where α and β are arbitrary constants.

Symmetry reductions. In this subsection, we have derived symmetry reductions of Eqs. (20) and (21) associated with the vector fields in the optimal system (28) by using similarity variables and further attempted to furnish exact solutions

$$(i)\Gamma_1 + \beta\Gamma_3.$$

Corresponding to this vector field, the form of the similarity variable and similarity solution are as follows:

$$\zeta = \frac{\rho}{z}, \theta(\rho, z) = F(\zeta), \mu(\rho, z) = \beta \log z + G(\zeta).$$

Substituting the expressions of similarity variable and similarity solution into Eqs. (20) and (21) yields the following system of reduced ODEs:

$$\begin{aligned}\zeta^3 F'' + F' + \zeta + 2F'\zeta^2 - \zeta\beta^2 \sin F \cos F - \\ - 2 \sin F \cos F \zeta^2 \beta G' - \sin F \cos F \zeta^3 G''^2 - \\ - \sin F \cos F \zeta G'^2 = 0, \\ \zeta G'' + G' + \beta \zeta - G''\zeta^2 - 2\zeta^2 G' - \\ - 2\zeta F'G' \tan F + 2\zeta^2 \beta F' \tan F - \\ - 2\zeta^3 F'G' \tan F = 0.\end{aligned}\quad (31)$$

In this case because of the complexity of reduced system (31), the following two particular cases have been worked out.

Case I. By considering $F(\zeta) = 0$, we found that metric (1) is reduced to static axially symmetric metric of Weyl in canonical coordinates and system (31) becomes

$$\zeta G'' + G' + \beta \zeta - \zeta^2 G'' - 2\zeta^2 G' = 0. \quad (32)$$

Solving Eq. (32), we obtained the solutions as follows:

$$\begin{aligned}G(\zeta) = \frac{\beta}{4} \ln(-2\zeta) - \frac{\beta}{4} \ln(-2\zeta + 2) + \\ + \frac{\beta}{2} \ln(\zeta - 1) + c_1 \text{Ei}(1, 2\zeta) - \\ - c_1 \exp(-2) \text{Ei}(1, 2\zeta - 2) + c_2,\end{aligned}\quad (33)$$

where c_1 and c_2 are arbitrary constants and Ei is the exponential integral.

Now, we have obtained solution of Eqs. (20) and (21) for static axially symmetric metric and further by back substitution to original variables, the exact solution of Eqs. (20) and (21) is given by:

$$\begin{aligned}\mu(\rho, z) = \frac{\beta}{4} \ln\left(\frac{-2\rho}{z}\right) - \frac{\beta}{4} \ln\left(\frac{-2\rho}{z} + 2\right) + \\ + \frac{\beta}{2} \ln\left(\frac{\rho}{z} - 1\right) + c_1 \left(\text{Ei}\left(1, 2\frac{\rho}{z}\right) \right) - \\ - c_1 \exp(-2) \text{Ei}\left(1, 2\frac{\rho}{z} - 2\right) + c_2.\end{aligned}\quad (34)$$

In Fig. 1, the picture representation of the solution (34) is given for $\beta = 1, c_1 = c_2 = 1$.

Case II. By putting $G(\zeta) = 0$, metric (1) is reduced to

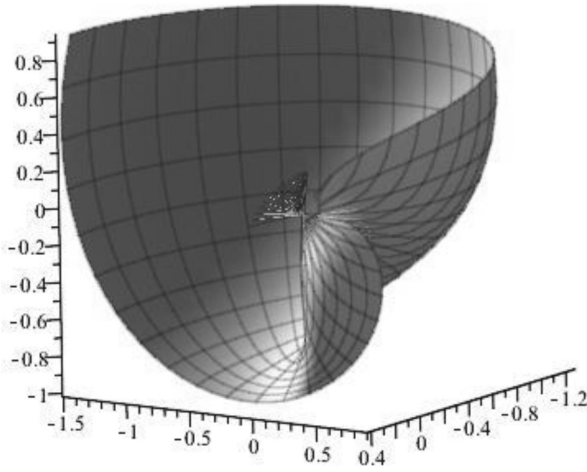


Fig. 1. Picture representation of Coriolis and centrifugal force solution (34), produced by rotating spherical shell in General Relativity, to field Eqs. (20) and (21) with $\beta = 1$, $c_1 = c_2 = 1$

$$ds^2 = -\exp(2\lambda)(d\rho^2 + dz^2) - \rho \cos \theta (d\phi^2 - dt^2) + 2\rho \sin \theta d\phi dt, \quad (35)$$

and then solving Eq. (31) and reverting back to the original variables. Thus, we have obtained the following exact solution of Eqs. (20) and (21):

$$\theta(\rho, z) = c_3 + \left(-\arctan \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\rho^2}{z^2}}} \right) + \left(\frac{4 + \left(\frac{\rho}{z} \right)^2}{3} \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{z^2}} \right) \right) c_4 \quad (36)$$

where c_3 and c_4 are arbitrary constants.

In Fig. 2, the picture representation of the solution (36) is given for $c_3 = c_4 = 1$.

Now, we attempt to furnish exact solutions

$$(ii) \Gamma_2 + \alpha \Gamma_3.$$

For this vector field, the forms of the similarity variable and the similarity solution are as follows:

$$\zeta = \rho, \theta(\rho, z) = F(\zeta), \mu(\rho, z) = G(\zeta) + \gamma z.$$

Using these forms in Eqs. (20) and (21), we obtain the system of reduced ODEs:

$$\begin{aligned} \zeta F'' + F' + \zeta \sin F \cos F (\alpha^2 + G'^2) &= 0, \\ \zeta F'' + G' - 2\zeta \tan F G &= 0, \end{aligned} \quad (37)$$

where the prime denotes the differentiation with respect to the variable ζ .

Now under this vector field, we are unable to obtain the nontrivial exact solutions. So we have used the well-developed numerical technique to solve the reduced problem. For this purpose, we have obtained the following four first-order equations:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dz} &= y_2, \\ \frac{dy_2}{dz} &= [-y_2 + \alpha^2 z \sin y_1 \cos y_1 + \\ &+ z \alpha^2 y_4^2 \sin y_1 \cos y_1] y_2 \cdot z^{-1}, \\ \frac{dy_1}{dz} &= y_3, \\ \frac{dy_4}{dz} &= \frac{-y_4 + 2y_2 y_4 z \tan y_1}{z}, \end{aligned} \quad (38)$$

with

$$\begin{aligned} y_1(45) &= 1.2, y_2(45) = 0, \\ y_3(45) &= 0, y_4(45) = 0.1. \end{aligned} \quad (39)$$

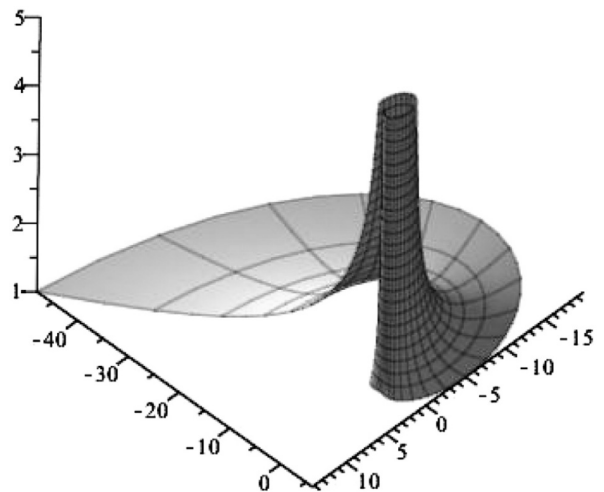


Fig. 2. Coriolis and centrifugal force solution (36), produced by rotating spherical shell in General Relativity, to field Eqs. (20) and (21) with $c_3 = c_4 = 1$

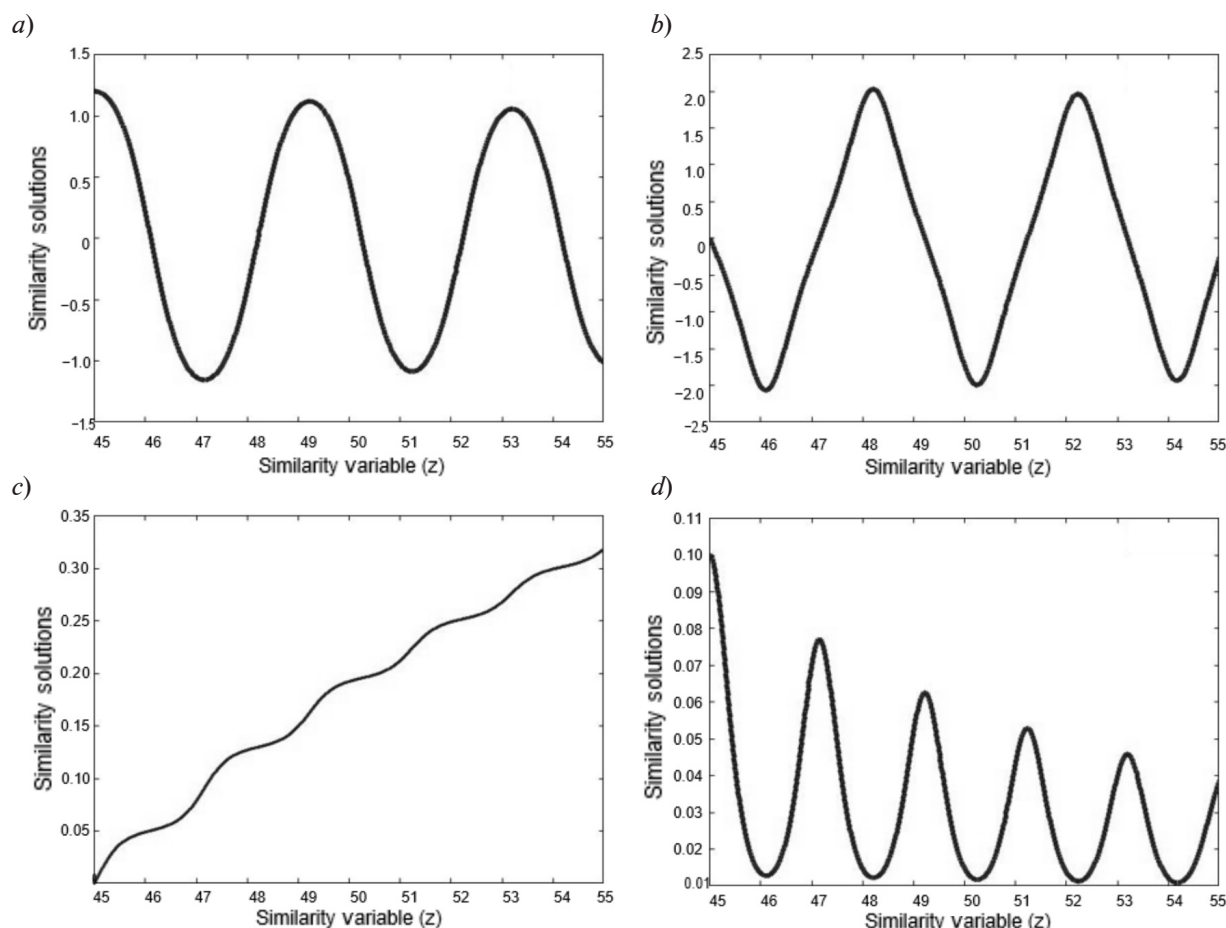


Fig. 3. Numerical solutions to field Eqs. (20) and (21) with respect to the reduced IVP (38), (39) when $\alpha^2 = 5$, with the initial value $z = 45$ at $h = 0.01$; the profiles of y_1 (a), y_2 (b), y_3 (c), y_4 (d) are presented

The numerical solutions to the initial value problem (IVP) (38), (39) are depicted above.

In Fig. 3, numerical solutions of field Eqs. (20) and (21) are obtained with respect to the reduced IVP (38), (39). Now the profiles of y_1 and y_2 show that the solution is periodic, and the profiles of y_3 and y_4 show that the solution is unbounded and damped oscillatory respectively.

Now, if we attempt to furnish exact solutions

$$(iii) \Gamma_3,$$

corresponding to this vector field, no such invariant solution exists.

Discussion and concluding remarks

In the present investigation, we have successfully implemented Lie symmetry

reduction to obtain the Lie symmetries admitted by field equations extracted from a metric which is supposed to describe the fields due to bodies in stationary rotation about their axes. The infinitesimal generators in optimal system of sub-algebras of the full Lie algebra of the coupled system of nonlinear partial differential equations of second order of field equations are considered. We completely solved the determining equations for the infinitesimal generators of Lie groups. Further, the group classification from the point of view of the optimal system of non-conjugate sub-algebras of the symmetry algebra of the nonlinear system has been performed under the adjoint action of the symmetry group. The various fields in the optimal system have been then exploited to get the reductions of PDEs into ODEs.



Due to the complexity of reduced ODEs, it is impossible to obtain the nontrivial exact solutions, so under the vector field $(i)\Lambda_1 + \beta\Lambda_2$, particular exact solutions are obtained for field Eqs. (20) and (21). Graphical representation of solutions (34) and (36) to field Eqs. (20) and (21) described the center forces, similar to the Coriolis and centrifugal forces of classical machines, produced by a rotating spherical shell in general relativity as shown in Figs. 1, 2. Now under the vector field $(ii)\Lambda_2 + \alpha\Lambda_3$, it is again impossible to obtain the nontrivial

exact solutions with respect to the reduced ODEs (37). So, under this vector field, IVP is posed for numerical solution. As a result, a numerical solution is found which is periodic, unbounded and damped oscillatory as shown in Fig. 3.

Acknowledgments

The authors thank the referees for their careful reading of the manuscript and for valuable suggestions that were helpful in improving this paper.

REFERENCES

- [1] **F.A.E. Pirani**, Invariant formulation of gravitational radiation theory, *Phys. Rev.* 105 (3) (1957) 1089–1099.
- [2] **C. Lanczos**, The splitting of the Riemann tensor, *Rev. Mod. Phys.* 34 (3) (1962) 379–389.
- [3] **T. Lewis**, Some special solutions of the equations of axially symmetric gravitational fields, *Proc. Roy. Soc. Lond. A.* 136 (829) (1932) 176–192.
- [4] **H. Stephani, D. Kramer, M. MacCallum, C. Hoenselaers, E. Herlt**, Exact solutions of Einstein's field equations, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [5] **M. Misra**, A non-singular electromagnetic field, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 58 (4) (1962) 711–712.
- [6] **J.M. Bardeen**, A variational principle for rotating stars in General Relativity, *Astrophys. J.* 162 (1970) 71–95.
- [7] **W.B. Bonnor**, A rotating dust cloud in General Relativity, *J. Phys. A: Math. Gen.* 10 (10) (1977) 1673–1678.
- [8] **J.N. Islam**, Rotating fields in General Relativity, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [9] **R. Grosso, H. Stephani**, Bianchi types of Lie point symmetries arising for differentially rotating stationary axisymmetric fluids, *Astron. Nachr.* 311 (5) (1990) 283–286.
- [10] **L. Marchildon**, Lie symmetries of Einstein's vacuum equations in N dimensions, *J. Nonlinear Math. Phys.* 5 (1) (1998) 68–81.
- [11] **A. Barnes**, On Stephani's rotating dust solutions, *Class. Quantum Grav.* 16 (3) (1999) 919–926.
- [12] **P. Klepáč**, Some cosmological solutions of Einstein's equations, *J. Phys.: Conf. Ser.* 82 (1) (2007) 012004.
- [13] **R.K. Gupta, K. Singh**, Symmetry analysis and some exact solutions of cylindrically symmetric null fields in General Relativity, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 16 (11) (2011) 4189–4196.
- [14] **A.T. Ali, A.K. Yadav**, Symmetry group analysis for perfect fluid inhomogeneous cosmological models in General Relativity, *Int. J. Theor. Phys.* 53 (7) (2014) 2505–2519.
- [15] **J.E. Cuchi, A. Gil-Rivero, A. Molina and E. Ruiz**, An approximate global solution of Einstein's equation for a rotating compact source with linear equation of state, *Gen. Rel. Grav.* 45 (7) (2013) 1433–1456.
- [16] **L. Kaur, R.K. Gupta**, On symmetries and exact solutions of the Einstein – Maxwell field equations via the symmetry approach, *Phys. Scr.* 87 (3) (2013) 035003–1–7.
- [17] **L. Kaur, R.K. Gupta**, Some invariant solutions of field equations with axial symmetry for empty space containing an electrostatic field, *Appl. Math. Comput.* 231 (15 March) (2014) 560–565.
- [18] **G.W. Bluman, S. Kumei**, Symmetries and differential equations, Applied Mathematical Sciences, Springer, Berlin, 1989.
- [19] **L.V. Ovsiannikov**, Group analysis of differential equations, London Academic Press, New York, 1982.
- [20] **P.J. Olver**, Applications of Lie groups to differential equations, Springer-Verlag, New York, 1993.
- [21] **N.H. Ibragimov**, Handbook of Lie group analysis of differential equations, CRC Press, Boca Raton, USA, 1994.
- [22] **H. Liu, J. Li, L. Liu**, Painlevé analysis, Lie symmetries, and exact solutions for the time-dependent coefficients Gardner equations, *Nonlinear Dyn.* 59 (3) (2010) 497–502.
- [23] **V. Kumar, R.K. Gupta, R. Jiwari**, Painlevé analysis, Lie symmetries and exact solutions for variable coefficients Benjamin–Bona–Mahony–Burger (BBMB) equation, *Commun. Theor. Phys.* 60 (3) (2013) 175–182.
- [24] **R.K. Gupta, V. Kumar, R. Jiwari**, Exact and numerical solutions of coupled short pulse equation with time dependent coefficients, *Nonlinear Dyn.* 79 (1) (2014) 455–464.

Received 10.02.2016, accepted 10.10.2017.

THE AUTHORS

KUMAR Vikas

DAV College Pundri Haryana
Kaithal, Haryana, 132026, India
vikasmath81@gmail.com

KAUR Lakhveer

Jaypee Institute of Information Technology
A-10, Sector-62, Noida, Uttar Pradesh, 201309, India
lakhveer712@gmail.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pirani F.A.E.** Invariant formulation of gravitational radiation theory // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 105. No. 3. Pp. 1089–1099.
2. **Lanczos C.** The splitting of the Riemann tensor // *Rev. Mod. Phys.* 1962. Vol. 34. No. 3. Pp. 379–389.
3. **Lewis T.** Some special solutions of the equations of axially symmetric gravitational fields, *Proc. Roy. Soc. Lond. A.* 1932. Vol. 136. No. 829. Pp. 176–192.
4. **Stephani H., Kramer D., MacCallum M., Hoenselaers C., Herlt E.** Exact solutions of Einstein's field equations. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
5. **Misra M.** A non-singular electromagnetic field // *Proc. Camb. Phil. Soc.* 1962. Vol. 58. No. 4. Pp. 711–712.
6. **Bardeen J.M.** A variational principle for rotating stars in General Relativity // *Astrophys. J.* 1970. Vol. 162. Pp. 71–95.
7. **Bonnor W.B.** A rotating dust cloud in General Relativity // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1977. Vol. 10. No. 10. Pp. 1673–1678.
8. **Islam J.N.** Rotating fields in General Relativity. Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
9. **Grosso R., Stephani H.** Bianchi types of Lie point symmetries arising for differentially rotating stationary axisymmetric fluids // *Astron. Nachr.* 1990. Vol. 311. No. 5. Pp. 283–286.
10. **Marchildon L.** Lie symmetries of Einstein's vacuum equations in N dimensions // *J. Nonlinear Math. Phys.* 1998. Vol. 5. No. 1. Pp. 68–81.
11. **Barnes A.** On Stephani's rotating dust solutions // *Class. Quantum Grav.* 1999. Vol. 16. No. 3. Pp. 919–926.
12. **Klepáč P.** Some cosmological solutions of Einstein equations // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2007. Vol. 82. No. 1. Pp. 012004.
13. **Gupta R.K., Singh K.** Symmetry analysis and some exact solutions of cylindrically symmetric null fields in General Relativity // *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2011. Vol. 16. No. 11. Pp. 4189–4196.
14. **Ali A.T., Yadav A.K.** Symmetry group analysis for perfect fluid inhomogeneous cosmological models in General Relativity // *Int. J. Theor. Phys.* 2014. Vol. 53. No. 7. Pp. 2505–2519.
15. **Cuchí J.E., Gil-Rivero A., Molina A., Ruiz E.** An approximate global solution of Einstein's equation for a rotating compact source with linear equation of state // *Gen. Rel. Grav.* 2013. Vol. 45. No. 7. Pp. 1433–1456.
16. **Kaur L., Gupta R.K.** On symmetries and exact solutions of the Einstein – Maxwell field equations via the symmetry approach // *Phys. Scr.* 2013. Vol. 87. No. 3. Pp. 035003–1–7.
17. **Kaur L., Gupta R.K.** Some invariant solutions of field equations with axial symmetry for empty space containing an electrostatic field // *Appl. Math. Comput.* 2014. Vol. 231. No. (15 March). Pp. 560–565.
18. **Bluman G.W., Kumei S.** Symmetries and differential equations. Applied mathematical sciences. Berlin: Springer, 1989.
19. **Ovsianikov L.V.** Group analysis of differential equations. New York: London Academic Press, 1982.
20. **Olver P.J.** Applications of Lie groups to differential equations. New York: Springer-Verlag, 1993.
21. **Ibragimov N.H.** Handbook of Lie group analysis of differential equations Boca Raton: CRC Press, 1994.
22. **Liu H., Li J., Liu L.** Painlevé analysis, Lie symmetries, and exact solutions for the time-dependent coefficients Gardner equations // *Nonlinear Dyn.* 2010. Vol. 59. No. 3. Pp. 497–502.
23. **Kumar V., Gupta R.K., Jiwari R.** Painlevé analysis, Lie symmetries and exact solutions for variable coefficients Benjamin–Bona–Mahony–Burger (BBMB) equation // *Commun. Theor. Phys.* 2013. Vol. 60. No. 3. Pp. 175–182.
24. **Gupta R.K., Kumar V., Jiwari R.** Exact and numerical solutions of coupled short pulse equation with time dependent coefficients // *Nonlinear Dyn.* 2014. Vol. 79. No. 1. Pp. 455–464.

Статья поступила в редакцию 10.02.2016, принята к публикации 10.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУМАР Викас — сотрудник кафедры математики Колледжа Дайянанд англо-ведической (DAV) системы образования, г. Пандри (Харьяна), г. Пандри провинции Харьяна, Индия.

Kaithal, Haryana, 132026, India
vikasmath81@gmail.com

КАУР Лакхвир — сотрудник кафедры математики Института информационных технологий Джепи (Джепи — группа с широким диапазоном деловых интересов), г. Нойда, Индия.

A-10, Sector-62, Noida, Uttar Pradesh, 201309, India
lakhveer712@gmail.com

DOI: 10.18721/JPM.10411

UDC 539.125

$N = 28$ ISOTONES: SHAPE COEXISTENCE TOWARDS PROTON DEFICIENT SIDE

G. Saxena¹, M. Kaushik²

¹Government Women Engineering College, Ajmer, India;

²Shankara Institute of Technology, Jaipur, India

We have employed the RMF+BCS (relativistic mean-field plus BCS) approach to study the phenomenon of shape coexistence in $N = 28$ isotones towards the proton-deficient side. Our present investigations include single particle energies, deformations, binding energies as well as excitation energies. It is found that towards the proton-deficient side, $N = 28$ shell closure disappears due to reduced gap between neutron $1f_{7/2}$ and $1f_{5/2}$ and the nuclei ^{40}Mg , ^{42}Si , and ^{44}S are found to possess shape coexistence, giving further support to weakening of the shell gap. These results are found to be in excellent agreement with other theoretical and experimental studies and are fortified with a variety of calculations and parameters.

Key words: neutron magic nucleus; relativistic mean-field plus BCS approach; shape coexistence; shell closure

Citation: G. Saxena, M. Kaushik, M. Kumar, $N = 28$ isotones: shape coexistence towards proton deficient side, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 134–142. DOI: 10.18721/JPM.10411

СОСУЩЕСТВОВАНИЕ ФОРМ ЯДЕР ИЗОТОНОВ, ИМЕЮЩИХ 28 НЕЙТРОНОВ И ДЕФИЦИТ ПРОТОНОВ

Г. Саксена¹, М. Каушик²

¹Правительственный женский инженерный колледж, г. Аджмер, Индия;

²Технологический институт Шанкары, г. Джайпур, Индия

В работе теоретически изучено явление сосуществования форм ядер изотонов (нуклиды, имеющие одинаковое количество нейтронов в ядре, $N = 28$ в данном случае, но разное количество протонов) при условии протонного дефицита. В расчетах использовано приближение RMF + BCS (релятивистская модель среднего поля плюс теория Бардина – Купера – Шриффера (БКШ)). Рассмотрены энергии одиночных частиц, деформации, энергетика связей, а также энергии возбуждения. Установлено, что заполнение энергетической оболочки ядра, состоящей из 28 нейтронов, нарушается ввиду протонного дефицита, вследствие уменьшения энергетической разности между нейтронными состояниями $1f_{7/2}$ и $1f_{5/2}$. Также установлено, что ядра ^{40}Mg , ^{42}Si и ^{44}S обладают сосуществованием форм, приводящим к дальнейшему уменьшению указанной энергетической разности в оболочке ядра. Установлено, что полученные результаты находятся в прекрасном соответствии с данными других теоретических и экспериментальных исследований и подкреплены рядом расчетов и соответствующими значениями параметров.

Ключевые слова: магическое ядро; релятивистская модель среднего поля плюс теория БКШ; сосуществование форм; заполнение оболочки

Ссылка при цитировании: Саксена Г., Каушик М. Сосуществование форм ядер изотонов, имеющих 28 нейтронов и дефицит протонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 134–142. DOI: 10.18721/JPM.10411

1. Introduction

The evolution of ground-state shapes in an isotopic or an isotonic chain is governed by changes of the shell structure of a single-nucleon orbital. In recent past, evolution of shell structure guiding shape coexistence has been observed in the $N = 20$ and $N = 28$ isotones around the proton drip-line [1 – 4]. In a more general manner, the major structural features along the isotonic and isotopic chains around the spherical magic numbers 8, 20, 28, 50, 82, and 126 were reviewed by Sorlin et al. [5] using evolution of the binding energies, trends of first collective states and characterization of single-particle states. A number of experimental investigations have shown [3, 6] that in the proton-deficient $N = 28$ isotones below ^{48}Ca the spherical shell gap progressively reduces and the low-energy spectra of ^{46}Ar , ^{44}S , and ^{42}Si display evidence of ground-state deformation and shape coexistence.

Theoretical treatment of evolution of shell closure has been successfully described using mean-field theories [7 – 9] and with their relativistic counterparts [10 – 15]. The main advantage of the RMF + BCS (Relativistic Mean-Field plus Bardeen – Cooper – Schrieffer theory) approach is that it provides the spin-orbit interaction in the entire mass region in a natural way [10 – 12]. This indeed has proved to be very crucial for the study of nuclei near the drip-line. As nuclei move away from stability and approach the drip-lines, the corresponding Fermi surface gets closer to zero energy at the continuum threshold. A significant number of the available single-particle states then form part of the continuum. Indeed, the RMF + BCS scheme [11, 14] yields results which are in close agreement with the experimental data and with those of continuum relativistic Hartree – Bogoliubov (RCHB) and other similar mean-field calculations [15]. Recently, deformed relativistic Hartree – Bogoliubov (RHB) theory in continuum has been developed aiming at a proper description of exotic nuclei, particularly for ^{42}Mg [16]. Moreover, development of the covariant density functional theory in continuum has been introduced for the description of neutron halo phenomena in medium heavy and heavy nuclei,

including the relativistic continuum Hartree – Bogoliubov theory, the relativistic Hartree – Fock – Bogoliubov theory in continuum and the deformed relativistic Hartree – Bogoliubov theory in continuum [17].

In recent past, the RMF approach has successfully investigated two-proton radioactivity [18], weakly bound drip-line nuclei [19] and magicity [20]. More recently, relativistic mean field study has extensively used to describe actinides and superheavy nuclei within covariant density functional theory [21], to calculate decay rates of various proton emitters [22], to study bubble structure [23], to analyze effects of particle-number fluctuation degree of freedom on symmetric and asymmetric spontaneous fission [24] and to calculate neutron capture cross-sections in nuclei near the $N = 82$ shell closure [25].

In this paper, we have investigated the shape coexistence phenomenon for proton deficient $N = 28$ isotones using the relativistic mean-field (RMF) plus BCS approach [18 – 20].

2. Relativistic mean-field model

Our RMF calculations have been carried out using the Lagrangian density model with nonlinear terms both for the σ and ω mesons along with the TMA parametrization as described in detail in Refs. [12, 14, 18]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}[\gamma^\mu \partial_\mu - M]\psi + \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \\ & - \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 - \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 - g_\sigma \bar{\psi} \sigma \psi - \frac{1}{4} H_{\mu\nu} H^{\mu\nu} + \\ & + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu + \frac{1}{4} c_3 (\omega_\mu \omega^\mu)^2 - g_\omega \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \omega_\mu - \\ & - \frac{1}{4} G_{\mu\nu}^a G^{a\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_\mu^a \rho^{a\mu} - \frac{1}{4} H_{\mu\nu} H^{\mu\nu} - \\ & - e \bar{\psi} \gamma_\mu \frac{(1 - \tau_3)}{2} A^\mu \psi, \end{aligned} \quad (1)$$

where the field tensors H , G and F for the vector fields are defined by

$$\begin{aligned} H_{\mu\nu} &= \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu, \\ G_{\mu\nu}^a &= \partial_\mu \rho_\nu^a - \partial_\nu \rho_\mu^a - 2g_\rho \epsilon^{abc} \rho_\mu^b \rho_\nu^c, \\ F_{\mu\nu} &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu, \end{aligned}$$

and other symbols have their usual meaning.

Based on the single-particle spectrum calculated by the RMF described above, we perform state dependent BCS calculations [26, 27]. The continuum is replaced by a set of positive energy states generated by enclosing the nucleus in a spherical box. Thus, the gap equations have the standard form for all the single particle states, i.e.,

$$\Delta_{j_1} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \times \sum_{j_2} \frac{\langle (j_1^2)0^+ | V | (j_2^2)0^+ \rangle}{\sqrt{(\varepsilon_{j_2} - \lambda)^2 + \Delta_{j_2}^2}} \sqrt{2j_2+1} \Delta_{j_2}, \quad (2)$$

where ε_{j_2} are the single particle energies, and λ is the Fermi energy, whereas the particle number condition is given by

$$\sum_j (2j+1) v_j^2 = N.$$

In the calculations we use for the pairing interaction a delta-force, i.e., $V = -V_0 \delta(\mathbf{r})$ with the same strength $V_0 = 350 \text{ MeV}/(\text{fm})^3$ for both protons and neutrons [14].

Apart from its simplicity, the applicability and justification of using such a δ -function form of interaction was discussed in Ref. [28], where it was shown in the context of HFB calculations that the use of a delta-force in a finite space simulates the effect of finite range interaction in a phenomenological manner. The pairing matrix element for the δ -function force is given by

$$\begin{aligned} \langle (j_1^2)0^+ | V | (j_2^2)0^+ \rangle &= \\ &= -\frac{V_0}{8\pi} \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)} I_R, \end{aligned} \quad (3)$$

where I_R is the radial integral having the form

$$I_R = \int dr \frac{1}{r^2} (G_{j_1}^* G_{j_2} + F_{j_1}^* F_{j_2})^2. \quad (4)$$

Here G_α and F_α denote the radial wave functions for the upper and lower components, respectively, of the nucleon wave function expressed as

$$\Psi_\alpha = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} iG_\alpha Y_{j_\alpha l_\alpha m_\alpha} \\ F_\alpha \sigma \cdot \hat{r} Y_{j_\alpha l_\alpha m_\alpha} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

and satisfy the normalization condition

$$\int dr \{ |G_\alpha|^2 + |F_\alpha|^2 \} = 1. \quad (6)$$

In Eq. (5) the symbol Y_{jlm} is used for the standard spinor spherical harmonics with the phase i^l . The coupled field equations obtained from the Lagrangian density in Eq. (1) are finally reduced to a set of simple radial equations which are solved self-consistently along with the equations for the state dependent pairing gap Δ_j and the total particle number N for a given nucleus.

The relativistic mean field description was extended for the deformed nuclei of axially symmetric shapes by Gambhir, Ring and their collaborators [11] using an expansion method. The treatment of pairing was carried out in Ref. [29] using state dependent BCS method as given in Ref. [18] for the spherical case. For axially deformed nuclei the rotational symmetry is no more valid and the total angular momentum j is no longer a good quantum number. Nevertheless, the various densities still are invariant with respect to a rotation around the symmetry axis. Here we took the symmetry axis to be the z -axis. Following Gambhir et al. [11], it was then convenient to employ the cylindrical coordinates

$$x = r_\perp \cos\varphi, \quad y = r_\perp \sin\varphi \quad \text{and} \quad z. \quad (7)$$

The spinor ψ_i with the index i is now labeled by the quantum numbers Ω_i , π_i and t_i , where Ω_i is the eigenvalue of the symmetry operator j_{z_i} (the projection of j_i on the z -axis), π_i indicates the parity and t_i has been used for the isospin.

In terms of these quantum numbers, the spinor can now be expressed in the following form:

$$\begin{aligned} \psi_i(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} f_i(\mathbf{r}) \\ ig_i(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} f_i^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \\ f_i^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega_i+1/2)\varphi} \\ ig_i^+(z, r_\perp) e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \\ ig_i^-(z, r_\perp) e^{i(\Omega_i+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_{t_i}(t). \end{aligned} \quad (8)$$

Here the four components $f_i(r_\perp, z)$ and $g_i(r_\perp, z)$ obey the Dirac equations.

For the axially symmetric case the spinors

$f_i(r_\perp, z)$ and $g_i(r_\perp, z)$ are expanded in terms of the eigenfunctions of a deformed axially symmetric oscillator potential as described in Refs. [11, 29]. The pairing gap Δ_k satisfies the gap equation

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k' > 0} \frac{\bar{V}_{kk'} |\Delta_{k'}|}{\sqrt{(\epsilon_{k'} - \lambda)^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad (9)$$

Here the symbols $\epsilon_{k'}$ and λ denote the single particle and Fermi energy, whereas the pairing matrix element $V_{kk'}$ for the symmetrical-ly deformed case using the zero-range δ -force is given by

$$\begin{aligned} \bar{V}_{ij} &= \langle \bar{u} \bar{u} | V | \bar{j} \bar{j} \rangle - \langle \bar{u} \bar{u} | V | \bar{j} \bar{j} \rangle = \quad (10) \\ &= -V_0 \int d^3 r [\psi_i^\dagger \psi_j^\dagger \psi_i^\dagger \psi_j^\dagger - \psi_i^\dagger \psi_j^\dagger \psi_i^\dagger \psi_j^\dagger]. \quad (11) \end{aligned}$$

For further details of these formulations we refer the reader to Refs. [11, 18, 29]. In addition, to get a more detailed picture of deformation in various other theories readers may refer to deformed relativistic Hartree – Bogoliubov (RHB) theory in continuum [16], deformed relativistic Hartree – Bogoliubov (DRHB) theory [30] and multidimensionally-constrained relativistic mean field (MDC-RMF) theory [31, 32].

3. Results and discussion

The binding energy maps exhibit variety of rapidly evolving shapes after successive removals of proton pairs towards the drip-line of $N = 28$ isotones. This variation of binding energy is shown in Fig. 1 with respect to the quadrupole deformation parameter β_{2m} for $N = 28$ isotones. As established and expected, we found a spherical configuration of doubly-magic ^{48}Ca with one sharp minimum at $\beta_{2m} = 0$. Towards the proton-rich side we have also found a spherical configuration for ^{50}Ti (see Fig. 1). By removing a pair of protons from ^{48}Ca , the energy surface of the corresponding isotone ^{46}Ar becomes soft with a shallow extended minimum along the oblate axis (shown in upper right panel). After another removal of a proton pair we obtained a coexistence of prolate and oblate minima at $\beta_{2m} = 0.38$ and -0.26 respectively for the nucleus ^{44}S as can be observed from the upper left panel of Fig. 1. These two minima are separated only by an excitation energy of 0.77 MeV and, therefore, we can expect to find pronounced mixing of prolate and oblate configurations in the low-energy collective states of this nucleus. Next, for ^{42}Si the binding energy displays a deep oblate minimum at $\beta_{2m} = -0.37$ whereas the

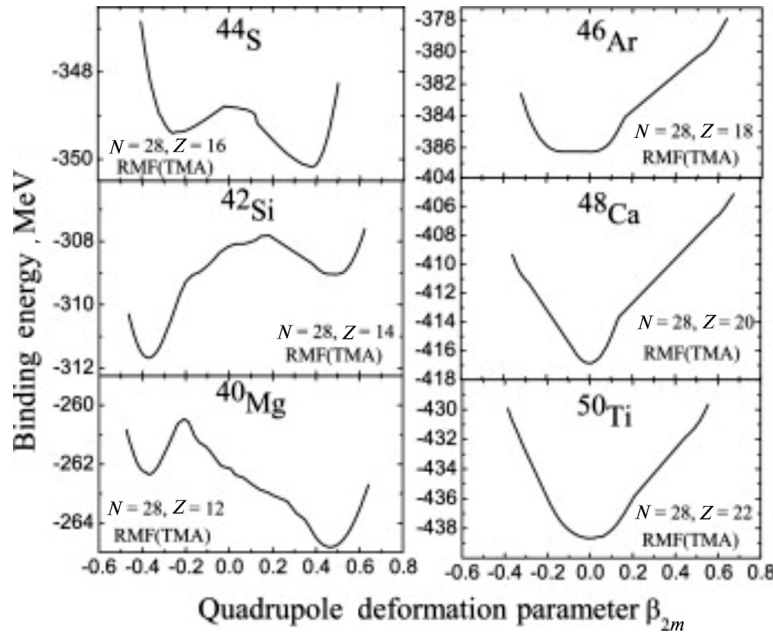


Fig. 1. The potential energy surface of $N = 28$ isotones (6 nuclei) as a function of the deformation parameter β_{2m}

Table 1

Calculation results of excitation energy values compared to those of other authors

Nucleus	Excitation energy, MeV	
	Our study	Other data
^{44}S	0.77	1.36 [33], 0.2 [1]
^{42}Si	2.60	2.50 [34], 1.5 [1]
^{40}Mg	3.50	1.38 [35]

Notes. The excitation energy is an energy difference between two minima as obtained in the deformed RMF calculations using TMA force parameters. Our results are compared with both theoretical and experimental ones [1, 33 – 35].

second prolate minimum is found at $\beta_{2m} = 0.49$ with an excitation energy of 2.6 MeV (see Fig. 1, the middle left panel). These results are similar to those obtained from the RHB theory by Lalazissis et al. [1] and the energy density functional analysis of shape evolution in $N = 28$ isotones [4]. Furthermore, with another proton pair removed, the very neutron-rich nucleus ^{40}Mg shows a deep prolate minimum at $\beta_{2m} = 0.46$ and an oblate minimum at $\beta_{2m} = -0.37$ with the excitation energy of 3.5 MeV (see Fig. 1, lower left panel).

One important observation that can be made from Fig. 1 is that successive removal of protons leads to complete change in the shapes. As can be seen from Fig. 1, ^{44}S has a more likely prolate shape due to the prolate minima standing below the oblate minima. With two protons less in ^{42}Si , oblate minima occur below the prolate minima, resulting in ^{42}Si having a

more likely oblate shape, whereas again with two protons less in ^{40}Mg , the existence of a prolate shape becomes more pronounced.

Therefore, from the variation shown in Fig. 1 we can conclude that the phenomenon of shape coexistence indeed exists towards the proton-deficient nuclei of $N = 28$ isotones. We found the excitation energy (energy difference between two minima) for the nuclei ^{40}Mg , ^{42}Si , ^{44}S due to shape mixing (Table 1), which are also compared with some other theoretical and experimental data [1, 33–35]. It is gratifying to note that our results are in good agreement with other data which confirm the shape coexistence in $N = 28$ isotone towards the proton-deficient side.

To compare our results with other theoretical calculations and experiments, in Table 2, we have shown quadrupole deformation for neutron-rich $N = 28$ isotones.

Table 2

Results of quadrupole deformation parameter for $N = 28$ isotones

Nucleus	Quadrupole deformation parameter			
	RMF (TMA)	Experiment [36]	FRDM [37]	HFB [38]
^{40}Mg	0.477	—	0.312	0.36
^{42}Si	−0.375	—	0.393	−0.33
^{44}S	0.380	0.254	0.247	−0.27
^{46}Ar	0.000	0.175	0.135	−0.20
^{48}Ca	0.000	0.106	0.000	0.12

Note: RMF(TMA) results are obtained in this study.

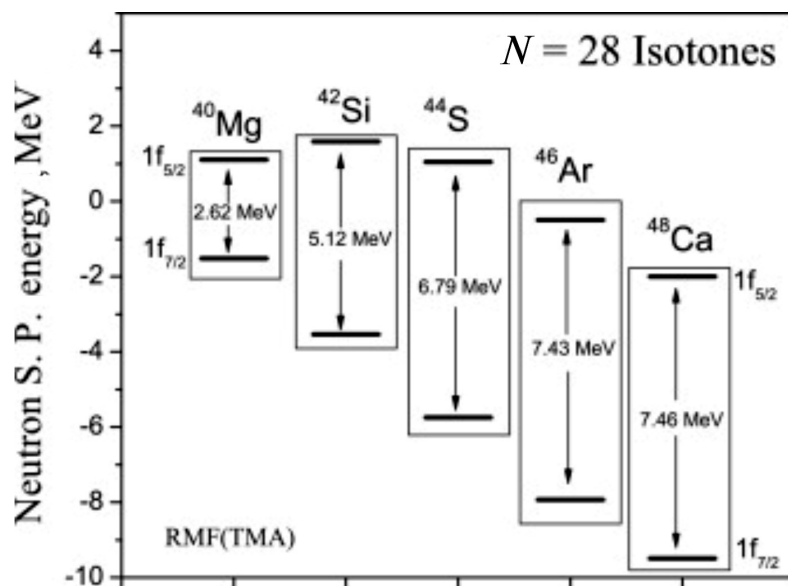


Fig. 2. Calculation results of energy difference between neutron $1f_{5/2}$ and $1f_{7/2}$ states responsible for $N = 28$ shell closure for five nuclei

As shown in the case of ^{48}Ca , magic nuclei possess a spherical configuration and therefore phenomenon of shape coexistence results to disappearance of $N = 28$ neutron shell closure. To demonstrate it we show in Fig. 2 the energy difference between neutron $1f_{5/2}$ and $1f_{7/2}$ states which gives rise to $N = 28$ shell closure. These single particle energies are calculated using the RMF framework with a spherical configuration [14, 20]. It is evident from Fig. 2 that the gap decreases significantly towards proton deficient side from 7.49 MeV for ^{48}Ca to 2.62 MeV for ^{40}Mg . This drastic change for the proton-deficient nuclei gives rise to the disappearance of $N = 28$ shell closure and the development of the phenomenon of shape coexistence.

4. Summary

In this paper, we have investigated the shape coexistence phenomenon in $N = 28$ isotones by employing relativistic mean-field plus BCS (RMF+BCS) approach [18 – 20]. For our study, the RMF calculations were carried out using the TMA parameter, and the results of single particle spectra, binding energy, excitation energy, etc., were analyzed for the phenomenon of the shape coexistence. We found through variation of binding energy with

quadrupole deformation that $N = 28$ isotones indeed showed shape coexistence towards the proton drip-line. Neutron-rich ^{40}Mg , ^{42}Si , and ^{44}S were found with mixed configuration of prolate and oblate shapes. This shape mixing in $N = 28$ isotones results in the collapse of spherical configuration and consequently $N = 28$ shell closure. It is indulging to note that our results of excitation energy are in good match with other communications [1, 33 – 35]. In addition to this, we also focused on single particle energies of $1f_{5/2}$ and $1f_{7/2}$ states and it was found that this shell gap decreased towards the proton-deficient side fortifying the conclusion of disappearance of $N = 28$ shell closure and shape coexistence.

Acknowledgements

Authors would like to thank Prof. H.L. Yadav, Banaras Hindu University, Varanasi, India, for his kind guidance and continuous support. The authors are indebted to Dr. L.S. Geng, RCNP, Osaka, Japan, for valuable correspondence. One of the authors (G. Saxena) gratefully acknowledges the support provided by Science and Engineering Research Board (DST), Government of India, under the young scientist project YSS/2015/000952.

REFERENCES

- [1] G.A. Lalazissis, D. Vretenar, P. Ring, M. Stoitsov, L. Robledo, Relativistic Hartree–Bogolyubov description of the deformed $N = 28$ region, *Phys. Rev. C*. 60 (1) (1999) 014310.
- [2] D. Vretenar, P. Ring, G.A. Lalazissis, Relativistic mean field description of nuclei at the drip lines, *AIP Conf. Proc.* 481 (1) (1999) 91–104.
- [3] C. Force, S. Grévy, L. Gaudefroy, O. Sorlin, L. Caceres, F. Rotaru, J. Mrazek, Prolate-spherical shape coexistence at $N = 28$ in ^{44}S , *Phys. Rev. Lett.* 105 (10) (2010) 102501.
- [4] Z.P. Li, J.M. Yao, D. Vretenar, T. Niki, H. Chen, J. Meng, Energy density functional analysis of shape evolution in $N = 28$ isotones, *Phys. Rev. C*. 84 (5) (2011) 054304.
- [5] O. Sorlin, M.G. Porquet, Nuclear magic numbers: new features far from stability, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 61 (2) (2008) 602–673.
- [6] L. Gaudefroy, J.M. Daugas, M. Hass, et al., Shell erosion and shape coexistence in $^{43}\text{S}_{27}$, *Phys. Rev. Lett.* 102 (9) (2009) 092501.
- [7] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, M. Ploszajczak, Pairing anti-halo effect, *Phys. Lett. B*. 496 (3) (2000) 154–160.
- [8] M. Grasso, N. Sandulescu, Nguyen Van Giai, R.J. Liotta, Pairing and continuum effects in nuclei close to the drip line, *Phys. Rev. C*. 64 (6) (2001) 064321.
- [9] N. Sandulescu, Nguyen Van Giai, R.J. Liotta, Resonant continuum in the Hartree – Fock + BCS approximation, *Phys. Rev. C*. 61 (6) (2000) 061301(R).
- [10] P.G. Reinhard, The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics, *Rep. Prog. Phys.* 52 (4) (1989) 439.
- [11] Y.K. Gambhir, P. Ring, A. Thimet, Relativistic mean-field theory for finite nuclei, *Ann. Phys.* 198 (1) (1990) 132–179.
- [12] Y. Sugahara, H. Toki, Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with nonlinear σ and ω terms, *Nucl. Phys. A*. 579 (3–4) (1994) 557–572.
- [13] P. Ring, Relativistic mean-field theory in finite nuclei, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 37 (1996) 193–263.
- [14] H.L. Yadav, S. Sugimoto, H. Toki, Relativistic mean field plus BCS approach to drip-line nuclei, *Mod. Phys. Lett. A*. 17 (38) (2002) 2523–2533.
- [15] J. Meng, H. Toki, S.G. Zhou, S.Q. Zhang, W.H. Long, L.S. Geng, Relativistic continuum Hartree–Bogoliubov theory for ground state properties of exotic nuclei, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 57 (2) (2006) 470–563.
- [16] L. Li, J. Meng, P. Ring, E.G. Zhao, S.G. Zhou, Deformed relativistic Hartree–Bogoliubov theory in continuum, *Phys. Rev. C*. 85 (2) (2012) 024312.
- [17] J. Meng, S.G. Zhou, Halos in medium-heavy and heavy nuclei with covariant density functional theory in continuum, *J. Phys. G*. 42 (9) (2015) 093101.
- [18] D. Singh, G. Saxena, M. Kaushik, H.L. Yadav, H. Toki, Study of two-proton radioactivity within relativistic mean-field plus BCS approach, *Int. Jour. of Mod. Phys. E*. 21 (9) (2012) 1250076.
- [19] G. Saxena, D. Singh, M. Kaushik, S. Somendro Singh, RMF+BCS approach for drip-line isotopes of Si, *Canadian J. Phys.* 92 (3) (2014) 253–258.
- [20] G. Saxena, D. Singh, Shell closure, loosely bound structure and halos in exotic nuclei, *J. Exp. Theor. Phys.* 116 (4) (2013) 567–578.
- [21] A.V. Afanasjev, S.E. Agbemava, Nuclear structure theory of the heaviest nuclei, *Acta Phys. Polon. B*. 46 (3) (2015) 405–417.
- [22] Y. Qian, Z. Ren, Calculations on decay rates of various proton emissions, *Eur. Phys. J. A*. 52 (3) (2016) 1–7.
- [23] A. Shukla, S. Aberg, A. Bajpeyi, Systematic study of bubble nuclei in relativistic mean field model, *Phys. Atom. Nucl.* 79 (1) (2016) 11–20.
- [24] J. Zhao, Multidimensionally-constrained relativistic mean-field study of spontaneous fission: Coupling between shape and pairing degrees of freedom, *Phys. Rev. C*. 93 (4) (2016) 044315.
- [25] S. Dutta, D. Chakraborty, G. Gangopadhyay, A. Bhattacharyya, Neutron capture reactions near the $N = 82$ shell-closure, *Phys. Rev. C*. 93 (2) (2016) 024602.
- [26] A.M. Lane, Nuclear theory: pairing force correlations and collective motion, Benjamin, New York, 1964.
- [27] P. Ring, P. Schuck, The nuclear many-body problem, Springer, Berlin, 1980.
- [28] J. Dobaczewski, H. Flocard, J. Treiner, Hartree–Fock–Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line, *Nucl. Phys. A*. 422 (1) (1984) 103–139.
- [29] L.S. Geng, H. Toki, S. Sugimoto, J. Meng, Relativistic mean field theory for deformed nuclei with the pairing correlations, *Prog. Theor. Phys.* 110 (5) (2003) 921–936.
- [30] S.G. Zhou, J. Meng, P. Ring, E.G. Zhao, Neutron halo in deformed nuclei, *Phys. Rev. C*. 82 (1) (2010) 011301(R).
- [31] B.N. Lu, J. Zhao, E.G. Zhao, S.G. Zhou, Multidimensionally-constrained relativistic mean-field models and potential-energy surfaces of actinide nuclei, *Phys. Rev. C*. 89 (1) (2014) 014323.
- [32] S.G. Zhou, Multidimensionally constrained covariant density functional theories nuclear shapes and potential energy surfaces, *Physica Scripta*. 91 (6) (2016) 063008.
- [33] S. Grévy, F. Negoita, I. Stefan, Observation of the 0_2^+ state in ^{44}S , *Eur. Phys. J. A*. 25 (1Supl)



(2005) 111–113.

[34] **J.A. Tostevin, B.A. Brown, E.C. Simpson**, Two-proton removal from ^{44}S and the structure of ^{42}Si , *Phys. Rev. C* 87 (2) (2013) 027601–027604.

[35] **R. Rodriguez-Guzmán, J.L. Egido, L.M. Robledo**, Correlations beyond the mean field in magnesium isotopes: angular momentum projection and configuration mixing, *Nucl. Phys. A* 709 (1–4) (2002) 201–235.

[36] **S. Raman, C.W. Nestor jr., P. Tikkanen**, Transition probability from the ground to the first

Received 20.08.2016, accepted 09.10.2017.

THE AUTHORS

SAXENA Gaurav

Government Women Engineering College

Makhupura, Nasirabad Road, Ajmer, Rajasthan 305002, India

gauravphy@gmail.com

KAUSHIK Manish

Shankara Institute of Technology

RIICO Industrial Area (Delhi Jaipur Highway) Kukas, Jaipur, Rajasthan 302028, India

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Lalazissis G.A., Vretenar D., Ring P., Stoits-ov M., Robledo L.** Relativistic Hartree–Bogolyubov description of the deformed $N = 28$ region // *Phys. Rev. C* 1999. Vol. 60. No. 1. P. 014310.

2. **Vretenar D., Ring P., Lalazissis G.A.** Relativistic mean-field description of nuclei at the drip lines // *AIP Conf. Proc.* 1999. Vol. 481. No. 1. Pp. 91–104.

3. **Force C., Grévy S., Gaudefroy L., Sorlin O., Caceres L., Rotaru F., Mrazek J.** Prolate-spherical shape coexistence at $N = 28$ in ^{44}S , *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. No. 10. P. 102501.

4. **Li Z.P., Yao J.M., Vretenar D., Niki T., Chen H., Meng J.** Energy density functional analysis of shape evolution in $N = 28$ isotones // *Phys. Rev. C* 2011. Vol. 84. No. 5. P. 054304.

5. **Sorlin O., Porquet M.G.** Nuclear magic numbers: new features far from stability // *Prog. Part. Nucl. Phys.* 2008. Vol. 61. No. 2. Pp. 602–673.

6. **Gaudefroy L., Daugas J.M., Hass M., et al.** Shell erosion and shape coexistence in $^{43}_{16}\text{S}_{27}$, *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102. No. 9. P. 092501.

7. **Bennaceur K., Dobaczewski J., Ploszajczak M.** Pairing anti-halo effect // *Phys. Lett. B* 2000. Vol. 496. No. 3. Pp. 154–160.

8. **Grasso M., Sandulescu N., Nguyen Van Giai, Liotta R.J.** Pairing and continuum effects in nuclei close to the drip line // *Phys. Rev. C* 2001. Vol. 64. No. 6. P. 064321.

9. **Sandulescu N., Nguyen Van Giai, Liotta R.J.** Resonant continuum in the Hartree – Fock + BCS

excited $2+$ state of even-even nuclides, *At. Data Nucl. Data Tables* 78 (1) (2001) 1–128.

[37] **P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa**, Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM (2012), *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 109–110 (2016) 1–204.

[38] **S. Goriely, N. Chamel, J.M. Pearson**, Skyrme–Hartree–Fock–Bogoliubov nuclear mass formulas: crossing the 0.6 MeV accuracy threshold with microscopically deduced pairing, *Phys. Rev. Lett.* 102 (15) (2009) 152503.

approximation // *Phys. Rev. C* 2000. Vol. 61. No. 6. P. 061301(R).

10. **Reinhard P.G.** The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics // *Rep. Prog. Phys.* 1989. Vol. 52. No. 4. P. 439.

11. **Gambhir Y.K., Ring P., Thimet A.** Relativistic mean-field theory for finite nuclei // *Ann. Phys.* 1990. Vol. 198. No. 1. Pp. 132–179.

12. **Sugahara Y., Toki H.** Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with nonlinear σ and ω terms // *Nucl. Phys. A* 1994. Vol. 579. No. 3–4. Pp. 557–572.

13. **Ring P.** Relativistic mean-field theory in finite nuclei // *Prog. Part. Nucl. Phys.* 1996. Vol. 37. Pp. 193–263.

14. **Yadav H.L., Sugimoto S., Toki H.** Relativistic mean-field plus BCS approach to drip-line nuclei // *Mod. Phys. Lett. A* 2002. Vol. 17. No. 38. Pp. 2523–2533.

15. **Meng J., Toki H., Zhou S.G., Zhang S.Q., Long W.H., Geng L.S.** Relativistic continuum Hartree–Bogoliubov theory for ground state properties of exotic nuclei // *Prog. Part. Nucl. Phys.* 2006. Vol. 57. No. 2. Pp. 470–563.

16. **Li L., Meng J., Ring P., Zhao E.G., Zhou S.G.** Deformed relativistic Hartree–Bogoliubov theory in continuum // *Phys. Rev. C* 2012. Vol. 85. No. 2. P. 024312.

17. **Meng J., Zhou S.G.** Halos in medium-heavy and heavy nuclei with covariant density functional theory in continuum // *J. Phys. G* 2015. Vol. 42.

No. 9. P. 093101.

18. **Singh D., Saxena G., Kaushik M., Yadav H.L., Toki H.** Study of two-proton radioactivity within relativistic mean-field plus BCS approach // Int. J. of Mod. Phys. E. 2012. Vol. 21. No. 9. P. 1250076.

19. **Saxena G., Singh D., Kaushik M., Sommorendro Singh S.** RMF+BCS approach for drip-line isotopes of Si // Canadian J. Phys. 2014. Vol. 92. No. 3. Pp. 253–258.

20. **Saxena G., Singh D.** Shell closure, loosely bound structure and halos in exotic nuclei // J. Exp. Theor. Phys. 2013. Vol. 116. No. 4. Pp. 567–578.

21. **Afanasjev A.V., Agbemava S.E.** Nuclear structure theory of the heaviest nuclei // Acta Phys. Polon. B. 2015. Vol. 46. No. 3. Pp. 405–417.

22. **Qian Y., Ren Z.** Calculations on decay rates of various proton emissions // Eur. Phys. J. A. 2016. Vol. 52. No. 3. Pp. 1–7.

23. **Shukla A., Aberg S., Bajpeyi A.** Systematic study of bubble nuclei in relativistic mean field model // Phys. Atom Nucl. 2016. Vol. 79. No. 1. Pp. 11–20.

24. **Zhao J.** Multidimensionally-constrained relativistic mean-field study of spontaneous fission: Coupling between shape and pairing degrees of freedom // Phys. Rev. C. 2016. Vol. 93. No. 4. P. 044315.

25. **Dutta S., Chakraborty D., Gangopadhyay G., Bhattacharyya A.** Neutron capture reactions near the $N = 82$ shell-closure // Phys. Rev. C. 2016. Vol. 93. No. 2. P. 024602.

26. **Lane A.M.** Nuclear theory: pairing force correlations and collective motion. New York: Benjamin, 1964.

27. **Ring P., Schuck P.** The nuclear many-body problem. Berlin: Springer, 1980.

28. **Dobaczewski J., Flocard H., Treiner J.** Hartree–Fock–Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line // Nucl. Phys. A. 1984. Vol. 422. No. 1. Pp. 103–139.

29. **Geng L.S., Toki H., Sugimoto S., Meng J.**

Relativistic mean field theory for deformed nuclei with the pairing correlations // Prog. Theor. Phys. 2003. Vol. 110. No. 5. Pp. 921–936.

30. **Zhou S.G., Meng J., Ring P., Zhao E.G.** Neutron halo in deformed nuclei // Phys. Rev. C. 2010. Vol. 82. No. 1. P. 011301(R).

31. **Lu B.N., Zhao J., Zhao E.G., Zhou S.G.** Multidimensionally-constrained relativistic mean-field models and potential-energy surfaces of actinide nuclei // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 89. No. 1. P. 014323.

32. **Zhou S.G.** Multidimensionally constrained covariant density functional theories nuclear shapes and potential energy surfaces // Physica Scripta. 2016. Vol. 91. No. 6. P. 063008.

33. **Grévy S., Negoita F., Stefan I.** Observation of the 0_2^+ state in ^{44}S , Eur. Phys. J. A. 2005. Vol. 25. No. 1 Suppl. Pp. 111–113.

34. **Tostevin J.A., Brown B.A., Simpson E.C.** Two-proton removal from ^{44}S and the structure of ^{42}Si // Phys. Rev. C. 2013. Vol. 87. No. 2. Pp. 027601–027604.

35. **Rodriguez-Guzmán R., Egido J.L., Robledo L.M.** Correlations beyond the mean field in magnesium isotopes: angular momentum projection and configuration mixing // Nucl. Phys. A. 2002. Vol. 709. No. 1–4. Pp. 201–235.

36. **Raman S., Nestor C.W., Tikkanen P.** Transition probability from the ground to the first excited 2^+ state of even-even nuclides // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 2001. Vol. 78. No. 1. Pp. 1–128.

37. **Möller P., Sierk A.J., Ichikawa T., Sagawa H.** Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM (2012) // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 2016. Vol. 109–110. Pp. 1–204.

38. **Goriely S., Chamel N., Pearson J.M.** Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov nuclear mass formulas: crossing the 0.6 MeV accuracy threshold with microscopically deduced pairing // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. No. 15. P. 152503.

Статья поступила в редакцию 29.08.2016, принята к публикации 09.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САКСЕНА Гаурав — сотрудник кафедры физики Правительственного женского инженерного колледжа, г. Аджмер, Индия.

Makhupura, Nasirabad Road, Ajmer, Rajasthan 305002, India
gaurvphy@gmail.com

КАУШИК Маниш — сотрудник кафедры физики Технологического института Шанкары, г. Джайпур, Индия.

RIICO Industrial Area (Delhi Jaipur Highway) Kukas, Jaipur, Rajasthan 302028, India
mkaushik007@gmail.com



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Бодров А.И.	82	Моос Е.Н.	92
Борисовский П.А.	92	Нуруллина Г.Д.	73
Гаврилов С.В.	92	Овчинников С.Ю.	111
Жителев В.А.	73	Панди А.К.	54
Зайлани Н.А.Б.М.	34	Панов Д.О.	21
Звир Е.А.	73	Паюров А.Я.	82
Зезина Т.И.	100	Рамадевуду Г.	7
Зоркин В.С.	82	Рис В.В.	21
Кандасами Р.	34	Саксена Г.	134
Каур Л.	124	Самдани М.	7
Каушик М.	134	Смирнов Е.М.	21
Киселев Г.В.	92	Смирновский А.А.	111
Киселева Л.И.	92	Степанов В.А.	92
Кудюкин А.И.	92	Строжук А.В.	73
Кумар В.	124	Фатиха Ф.Н.Б.Дж.	34
Кумар М.	54	Цыбин О.Ю.	100
Куприенко М.В.	73	Чари М.Н.	7
Кюн В.В.	82	Чуляева Е.Г.	82
Ларионов Н.В.	111	Шарифуддин М.	7
Махмудов М.Н.	92	Шмидт А.А.	111

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 10, № 4, 2017**

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 24.12.2017. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 18,3. Уч.-изд. л. 18,3. 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 двойными международными стандартными серийными 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 международную систему 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 переносов. 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