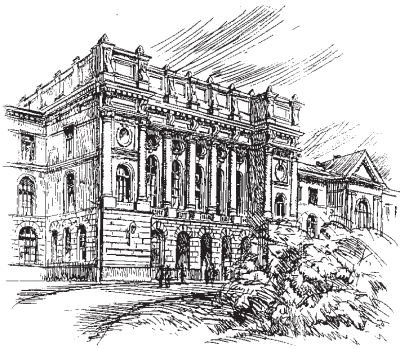
1(116)/2011



Научно-технические ведомости СПбГПУ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета

Федеральное агентство по образованию
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН; *Васильев Ю.С.*, академик РАН (председатель);
Костюк В.В., академик РАН; *Лопота В.А.*, чл.-кор. РАН;
Окрепилов В.В., чл.-кор. РАН; *Патон Б.Е.*, академик РАН и НАН Украины;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН; *Федоров М.П.*, чл.-кор. РАН;
Фортов В.Е., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Васильев Ю.С., академик РАН (главный редактор); *Арсеньев Д.Г.*, д-р техн. наук, профессор;
Бабкин А.В., д-р экон. наук, профессор (зам. гл. редактора);
Боронин В.Н., д-р техн. наук, профессор; *Глухов В.В.*, д-р экон. наук, профессор;
Дегтярева Р.В., д-р истор. наук, профессор; *Иванов А.В.*, д-р техн. наук, профессор;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор; *Козловский В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН (зам. гл. редактора); *Юсупов Р.М.*, чл.-кор. РАН.

СЕРИЯ "ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ"

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ СЕРИИ

Алферов Ж.И., академик РАН — председатель;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Рыбин В.В., чл.-кор. РАН;
Сурис Р.А., академик РАН;
Финкельштейн А.М., чл.-кор. РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор — председатель;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент — отв. секретарь;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАМН;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор — зам. председателя.

Журнал выходит под научно-методическим руководством Российской академии наук с 1995 г.

Журнал включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук.

Журнал издается в пяти сериях:
Наука и образование;
Физико-математические науки;
Экономические науки;
Информатика, телекоммуникации, управление;
Гуманитирные и общественные науки.

Журнал зарегистрирован в Госкомпечати РФ. Свидетельство № 013165 от 23.12.94.

Подписной индекс **71823** в каталоге "Газеты. Журналы" Агентства "Роспечать".

Журнал включен в базу данных "Российский индекс научного цитирования" (РИНЦ), размещенную на платформе Национальной электронной библиотеки на сайте http://www.elibraru.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, 29.
Тел. редакции серии (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2011

Содержание

Физика конденсированного состояния

Орленко Ф.Е., Зегря Г.Г. *Переход диэлектрик — металл в немагнитном кристаллическом полупроводнике антимонида индия в магнитном поле* 7

Емельянов В.М., Калюжный Н.А., Минтаиров М.А., Минтаиров С.А., Шварц М.З., Лантратов В.М. *Оптимизация концентраторных трехпереходных солнечных элементов* 11

Зеликман М.А., Поцелуев К.А. *Влияние структурного фактора на мейсснеровское состояние в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде* 18

Немов С.А., Филиппов С.И. *Расчет параметров примесных состояний олова в теллуриде висмута по данным эффекта Холла* 26

Математическое моделирование физических процессов

Ганин П.Г., Шмидт А.А. *Теоретическая оценка диаметра капель, образованных при дроблении наибольших капель в аппарате с перемешиванием* 29

Плетнев А.А., Талалов В.А. *Математическая модель тепломассопереноса в ванне шлакового расплава многоэлектродной руднотермической электропечи* 36

Снегирёв А.Ю., Сажин С.С., Талалов В.А. *Модель и алгоритм расчета теплообмена и испарения капель диспергированной жидкости* 44

Кривцун А.М., Сетейкин А.Ю. *Анализ процессов распространения оптического излучения в биологических средах с использованием вычислений на графических процессорах* 55

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Верховцев А.В., Полозков Р.Г., Иванов В.К., Король А.В., Соловьёв А.В. *Исследование электронной структуры эндофуллеренов инертных газов* 61

Математическая физика

Козлов В.Н., Трофимов П.А., Акимов А.И. *Обратное преобразование Ханкеля для смешанной краевой задачи на конечном интервале* 71

Приборы и техника физического эксперимента

Иванов Ю.Ф., Невский С.А., Коновалов С.В., Громов В.Е. *Влияние электрического потенциала на процесс перестройки дислокационных субструктур алюминия при релаксации напряжений* 78

Елизарова М.В., Миронов В.О. *Оценка погрешности сглаживания дозиметрических данных при инсталляции систем планирования дистанционной лучевой терапии* 82

Астрофизика

Чариков Ю.Е., Склярова Е.М. *Концепция природы тепловых вспышек на Солнце* 88

Нестеренок А.В., Найденов В.О. *Моделирование процессов распространения ядерно-активной компоненты космических лучей в атмосфере Земли* 94

Кропотина Ю.А., Густов М.Ю., Красильщиков А.М., Левенфиш К.П., Павлов Г.Г. *Многопроцессорный трехмерный гибридный код для моделирования микроскопических явлений в космической плазме* 99

Быков А.М., Гладилин П.Е., Осипов С.М., Павлов Г.Г. *Новый класс галактических рентгеновских источников как результат взаимодействия звездного ветра с остатком сверхновой звезды* 106

Физическая электроника

Головицкий А.П. *Слаботочный тлеющий разряд низкого давления в электроотрицательных газах* ... 111

Механика

Нгуен Ван Тханг. *Силы и моменты, действующие на ротор в упорном подшипнике скольжения, с учетом гидродинамики смазки и центробежных сил* 116

Жгутов В.М. *Математические модели, алгоритм исследования и анализ устойчивости упругих ребристых оболочек при конечных прогибах* 122

Хроника

Кесаманлы Ф.П. *Андрей Дмитриевич Сахаров (к 90-летию со дня рождения)* 130

Сведения об авторах, контактные данные 141

Аннотации, ключевые слова 145

Contents

Condensed matter physics

Orlenko F.E., Zegrya G.G. *Metal — insulator transition in a nonmagnetic InSb crystal semiconductor in the magnetic field* 7

Emelyanov V.M., Kalyuzhniy N.A., Mintairov M.A., Mintairov S.A., Shvarts M.Z., Lantratov V.M. *Optimization of the concentrator three-junctional solar cells* 11

Zelikman M.A., Potseluev K.A. *The influence of structural factor on the Meissner state in the 3D-ordered Josephson medium* 18

Nemov S.A., Filippov S.I. *Calculation of parameters of tin impurity states in bismuth telluride using the Hall effect data* 26

Simulation of physical processes

Ganin P.G., Schmidt A.A. *Theoretical estimation of the diameter of the droplets formed in a breakup of the largest droplets in the process vessel with stirring* 29

Pletnev A.A., Talalov V.A. *Mathematical model of heat and mass transfer in the electric furnace molten slag bath* 36

Snegirev A.Yu., Sazhin S.S., Talalov V.A. *A model and computational algorithm for heat exchange and evaporation of droplets of dispersed liquid* 44

Krivtsun A.M., Seteikin A.Yu. *An analysis of light propagation process in biological media using graphics processing units technique* 55

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Verkhovtsev A.V., Polozkov R.G., Ivanov V.K., Korol A.V., Solov'yov A.V. *An investigation of the electronic structure of noble gas endohedral fullerenes* 61

Mathematical physics

Kozlov V.N., Trofimov P.A., Akimov A.I. *The inverse Hankel transformation for the mixed boundary value problem in the closed interval* 71

Experimental technique and devices

Ivanov Yu.F., Nevskiy S.A., Konovalov S.V., Gromov V.E. *The influence of electrical potential on changing a dislocation substructure of aluminium at a stress relaxation* 78

Elizarova M.V., Mironov V.O. *An estimation of inaccuracy in dosimetric data smoothing when installing the remote radiation therapy planning system* 82

Astrophysics

Charikov Yu.E., Sklyarova E.M. *The concept of the origin of thermal flares on the Sun* 88

Nesterenok A.V., Naidenov V.O. *The simulation of propagation of cosmic rays nucleonic component in the Earth's atmosphere* 94

Kropotina J.A., Gustov M.Yu., Krassilchtchikov A.M., Levenfish K.P., Pavlov G.G. *Multiprocessor 3D-hybrid code for astrophysical plasma modeling* 99

Bykov A.M., Gladilin P.E., Osipov S.M., Pavlov G.G. *A new class of galactic X-ray sources resulting from interaction of stellar wind with a supernova remnant* 106

Physical electronics

Golovitski A.P. *The low-current low-pressure glow discharge in the electronegative gases* 111

Mechanics

Nguyen Van Thang. *Forces and moments acting on a rapidly rotating floating bearing with allowance of lubrication hydrodynamics and centrifugal force* 116

Zhgoutov V. M. *Mathematical models, the research algorythm and the ribbed shells steadiness analysis at finite bending flexure* 122

Chronicle

Kesamanly F.P. *Andrey Dmitrievich Sakharov (on the occasion of his 90th birthday)* 130

About the authors, contact information 141

Abstracts, key words 149

УДК 539.1 (075.8)

Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря

ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК — МЕТАЛЛ В НЕМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ АНТИМОНИДА ИНДИЯ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Впервые эффект гигантского отрицательного магнетосопротивления в немагнитном кристалле при увеличении магнитного поля был обнаружен в 1984 году, когда наблюдалось уменьшение сопротивления более чем в тысячу раз в одноосно деформированном антимониде индия, легированном марганцем [1]. Собственно переход в диамагнитное состояние в одноосно деформированном кристалле интерпретировался тогда как возрастание обменного взаимодействия дырок на акцепторах вследствие расщепления валентной зоны [1, 2] в присутствии одноосного сжатия. Магнитное поле индуцирует металлическое состояние вследствие того, что парамагнитное расщепление энергии дырок на акцепторах становится сравнимо с шириной примесной зоны. Для описания эффекта усиления обменного взаимодействия в одноосно деформированном кристалле используется модельный гамильтониан обменного взаимодействия пар акцепторов, расположенных по оси сжатия, в следующем виде:

$$\hat{H} = c_0 + c_1\left(\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2\right) + c_2\left(\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2\right)^2 + c_3\left(\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2\right)^3, \quad (1)$$

где коэффициенты $c_0 - c_3$ являются неопределенными, $\hat{\mathbf{j}}_1, \hat{\mathbf{j}}_2$ — операторы векторов спинов 1-й и 2-й дырок, величина спина каждой дырки на акцепторе $j = 3/2$.

При одноосной деформации энергия основного состояния акцептора расщепляется, и низшим будет состояние с проекцией спина на ось деформации $j_z = \pm 1/2$. Анализ гамильтониана (1) приводит к наложению определенных условий на соотношения неопределенных коэффициентов. При выполнении этих условий в работах [1, 3] находятся допустимые значения энергии системы и их спиновые состояния. Подобный подход использовался при анализе систем частиц со спинами, равными единице, например в работах Халдане и других [4– 6], где феноменологические коэффициенты при различных степенях скалярных произведений спиновых операторов варьировались с целью получения определенной формы гамильтониана, допускающей существование собственных значений.

Описание систем частиц со спинами, отличными от 1/2, представляет собой отдельную проблему. Имеющийся в теории спиновых систем гамильтониан Гейзенберга может описывать системы частиц с половинными спинами и не может быть использован для описания систем частиц, обладающих произвольным спином, отличным от 1/2 . Универсальный гамильтониан обменного взаимодействия в спиновом представлении получен в работе [7], а также для спина, равного единице, — в работе [8].

В настоящей статье мы получим гамильтониан обменного взаимодействия в спиновом представлении для пары частиц со спином 3/2 и найдем возможные собственные значения энергии парного взаимодействия акцепторов, расположенных на оси сжатия. Мы покажем также, что основное антиферромагнитное состояние в антимониде индия, легированном марганцем, не является простым, а вырождено по полному спину пары акцепторов, который может иметь два значения: $\sigma = 0$ и $\sigma = 2$. Окончательно вырождение снимается при наложении сильного магнитного поля, которое при этом индуцирует переход в магнитное состояние с $\sigma = 2$ и одновременно переход в проводящее состояние.

Гамильтониан обменного взаимодействия в спиновом представлении

Гамильтониан $\hat{H}(i,j)$, описывающий парное взаимодействие, может быть в представлен как сумма одночастичных гамильтонианов $\hat{h}(i)+\hat{h}(j)=\hat{H}^0(i,j)$ и оператора парного взаимодействия $\hat{V}(i,j)$:

$$\hat{H}(i,j)=\hat{H}^0(i,j)+\hat{V}(i,j). \qquad (2)$$

Пусть $\varphi_k(i),\varphi_l(j)$ — собственные функции одночастичных гамильтонианов $\hat{h}(i),\hat{h}(j)$, соответствующие состояниям $\varepsilon_k,\varepsilon_l$. Тогда координатная часть двухчастичной функции невзаимодействующих частиц с учетом принципа неразличимости будет либо симметричной, либо антисимметричной:

$$\Phi_{s/a}(i,j)=\frac{1}{f}(\varphi_k(i)\varphi_l(j)\pm\varphi_l(i)\varphi_k(j)). \qquad (3)$$

В этом случае поправка к полной энергии двухчастичной системы, вычисленная по теории возмущений, будет иметь вид:

$$E^{(1)}=K\pm A, \qquad (4)$$

где прямой и обменный вклады в энергию обозначены буквами K и A, соответственно, а знак $\pm$ однозначно связан с симметрией координатной части волновой функции (3).

При этом полная волновая функция системы двух фермионов должна быть антисимметричной, и симметрия спиновой части должна быть дополнительной к координатной части:

$$\Psi_a(i,j)=\Phi_{s/a}(i,j)\cdot X_{a/s}(i,j). \qquad (5)$$

Иными словами, множитель ±1 перед обменным вкладом в поправке (4) однозначно связан с симметрией спиновой части волновой функции для фермионов: $+1$ — для $\Phi_s(i,j)$ и следовательно $X_a(i,j)$, и -1 — для $\Phi_a(i,j)$ и следовательно $X_s(i,j)$.

Составим оператор $\hat{P}_{j,j}$, действующий в спиновом пространстве, собственными значениями которого будут $+1$ или -1 в соответствии с указанным правилом знаков (5), и являющийся функционалом оператора скалярного произведения спиновых операторов двух частиц.

Для системы двух частиц со спинами $j_1=j_2=j$ полный спин J может принимать значения $2j,\ 2j-1,\ldots,0$ (всего $2j+1$ значение).

Собственное значение оператора скалярного произведения операторов спина

$$\overline{\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2}=\frac{1}{2}\overline{\left(\hat{J}^2-2\hat{j}^2\right)}=$$

$$=\frac{1}{2}\left[J(J+1)-2j(j+1)\right] \qquad (6)$$

также принимает $2j+1$ значение.

Заметим, что функции, соответствующие суммарному спину J и его проекции на ось z, имеют вид

$$|J,J_z\rangle=\sum_{j_{1z}j_{2z}}C^{JJ_z}_{j_1j_{1z}j_2j_{2z}}|j_1,j_{1z}\rangle|j_2,j_{2z}\rangle, \qquad (7)$$

где

$$C^{JJ_z}_{j_1j_{1z}j_2j_{2z}}=(-1)^{j_1+j_2-J}\,C^{JJ_z}_{j_2j_{2z}j_1j_{1z}}. \qquad (8)$$

В случае $j_1=j_2=j$ выражение (8) перепишется так:

$$C^{JJ_z}_{j\,j_{1z}j\,j_{2z}}=(-1)^{2j-J}\,C^{JJ_z}_{j\,j_{2z}j\,j_{1z}}. \qquad (9)$$

Из формулы (9) следует, что коэффициенты при произведениях одночастичных спиновых функций, отличающихся перестановкой индексов, либо симметричны, либо антисимметричны.

Таким образом, функция

$$|J,J_z\rangle=\sum_{j_{1z}j_{2z}}C^{JJ_z}_{j\,j_{1z}j\,j_{2z}}|j\,,j_{1z}\rangle|j\,,j_{2z}\rangle \qquad (10)$$

в случае фермионов (j — полуцелое число) для нечетных значений полного спина $J=2j, J=2j-2,\ldots, J=1$, в соответствии с формулой (9) симметрична (что соответствует антисимметричной координатной части) и требует для проектора собственное значение -1. Указанная функция (10) антисимметрична для четных значений полного спина $J=2j-1, J=2j-3,\ldots, J=0$, что соответствует симметричной координатной части; тогда действие указанного оператора дает значение $+1$.

Для получения явного вида указанного оператора требуем выполнения условия

$$\hat{P}_{jj}|J,J_z\rangle=(-1)^J|J,J_z\rangle. \qquad (11)$$

Далее будем искать оператор в виде полинома

$$\hat{P}_{j,j}=c_1\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^{2j}+c_2\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^{2j-1}+\ldots+$$

$$+c_{2j}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)+c_{2j+1}. \qquad (12)$$

Здесь число свободных коэффициентов равно числу возможных собственных значений оператора скалярного произведения (6); в нашем случае это число равно четырем.

Для определения свободных коэффициентов, удовлетворяющих свойству оператора (12), составим систему $(2j+1)$ линейных уравнений:

$$c_1\overline{\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)}^{2j}+c_2\overline{\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)}^{2j-1}+\ldots+$$

$$+c_{2j}\overline{\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)}+c_{2j+1}\Big|_J=(-1)^J. \qquad (13)$$

Эта система имеет единственное решение, то есть единственный набор коэффициентов для двух частиц с заданными спинами:

$$c_1=\frac{\Delta_1}{\Delta},\ldots,c_{2j+1}=\frac{\Delta_{2j+1}}{\Delta}, \qquad (14)$$

где
$$\Delta=\begin{vmatrix}\left(j^2\right)^{2j}, & \left(j^2\right)^{2j-1}, & \ldots,1\\ \left[j(j-2)\right]^{2j}, & \left[j(j-2)\right]^{2j-1}, & \ldots,1\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & \ldots,1\\ \left[-j(j+1)\right]^{2j}, & \left[-j(j+1)\right]^{2j}, & \ldots,1\end{vmatrix},$$

а определители Δ_k получаются заменой k-го столбца в главном определителе Δ на столбец свободных членов, стоящих в правой части системы (13).

Из этого следует однозначность задания оператора (12).

С помощью полученного оператора можно записать спиновый гамильтониан двухчастичной системы с учетом свойств симметрии координатной части волновой функции, непосредственно связанных с величиной полного спина J. Для этого заменим в выражении (4) множитель ±1 перед обменным вкладом на полученный оператор $\hat{P}_{jj}$, действующий в спиновом пространстве:

$$\hat{E}^{(1)}=K+A\cdot\hat{P}_{j,j}. \qquad (15)$$

Приведем явный вид операторов четности перестановки и гамильтониана пары частиц со спинами $j=3/2$.

Для частиц со спином 3/2 оператор четности следует выражению

$$\hat{P}_{3/2,3/2}=-\frac{2}{9}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^3-\frac{11}{18}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^2+$$

$$+\frac{9}{8}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)+\frac{67}{32}, \qquad (16)$$

откуда следует вид гамильтониана взаимодействующих частиц со спином 3/2:

$$\hat{H}_{int}=K+A\left\{-\frac{2}{9}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^3-\frac{11}{18}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)^2+\right.$$

$$\left.+\frac{9}{8}\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)+\frac{67}{32}\right\}. \qquad (17)$$

Этот гамильтониан содержит нелинейные вклады от величины квадрата парного спина; при этом константа A обменного взаимодействия для случая деформации сжатия — отрицательна.

Энергия основного состояния пары акцепторов со спином 3/2

Полученный гамильтониан может быть переписан в виде, который явным образом содержит оператор квадрата спина $\hat{\sigma}^2_{1,2}$ пары частиц с номерами 1, 2:

$$\hat{H}_{int}=K+A\left\{-\frac{2}{9}\left(\hat{\sigma}^2_{1,2}\right)^3-\frac{11}{18}\left(\hat{\sigma}^2_{1,2}\right)^2+\right.$$

$$\left.+\frac{9}{8}\left(\hat{\sigma}^2_{1,2}\right)+\frac{67}{32}\right\}. \qquad (18)$$

Тогда значение энергии системы, отсчитанное от $E_0=K$, где $\sigma(\sigma+1)$ — собственное значение квадрата суммарного спина, может быть определено как

$$E=A\left\{-\frac{2}{9}(\sigma(\sigma+1))^3-\frac{11}{18}(\sigma(\sigma+1))^2+\right.$$

$$\left.+\frac{9}{8}(\sigma(\sigma+1))+\frac{67}{32}\right\}. \qquad (19)$$

Будем считать значение спина пары непрерывно меняющейся величиной, тогда можно установить некоторые закономерности в поведении обменного вклада от парного взаимодействия частиц.

Обозначим за x значение скалярного произведения двух спинов частиц:

$$x=\overline{\left(\hat{\mathbf{j}}_1\cdot\hat{\mathbf{j}}_2\right)}=\frac{1}{2}\left[\sigma(\sigma+1)-2j(j+1)\right]. \qquad (20)$$

Значения x при различных значениях σ для частиц со спином, равным 3/2

σ	0	1	2	3
x	−15/4	−11/4	−3/4	9/4

Тогда для частиц со спином, равным 3/2, картина выглядит так, как представлено в таблице.

Обменный вклад от парного взаимодействия, измеренный в единицах A как функция непрерывно меняющейся переменной x в интервале $[-15/4, 9/4]$, есть

$$y_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} = -\frac{2}{9}x^3 - \frac{11}{18}x^2 + \frac{9}{8}x + \frac{67}{32}. \qquad (21)$$

В этом случае имеется неоднозначность в определении равновесного состояния, так как энергетически наиболее выгодное состояние лежит как вблизи точки с $x = -15/4$, что соответствует значению спина пары $\sigma = 0$, так и вблизи точки $x = -3/4$, или $\sigma = 2$. Зависимость энергии (измеряемой в значениях константы обменного взаимодействия с учетом его знака) от величины полного спина σ показана на рисунке.

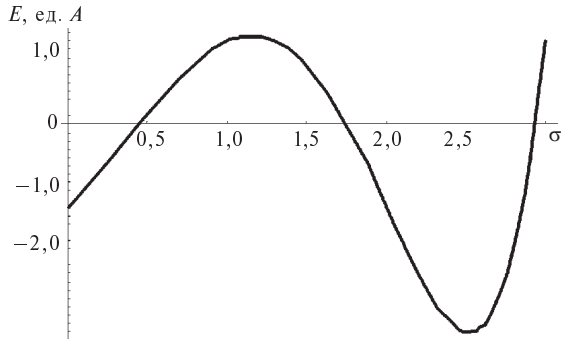


Рис. Зависимость энергии пары от величины полного спина

Из выражения (19) и рисунка хорошо видно, что поправка к энергии пары

$$E^{(1)} = K + A = K - |A|$$

имеет место при двух значениях суммарного спина: $\sigma = 0$ и $\sigma = 2$ (антисимметричное состояние по спину). Таким образом, обменное взаимодействие снимает вырождение по симметрии, но полностью не снимает вырождение по суммарному спину. Окончательное снятие вырождения происходит при наложении магнитного поля.

Система частиц со спином 3/2 в магнитном поле

Гамильтониан (18) перепишется для системы, помещенной в магнитное поле, следующим образом:

$$\hat{H}_{int} = K + A\left\{-\frac{2}{9}(\hat{\sigma}_{1,2}^2)^3 - \frac{11}{18}(\hat{\sigma}_{1,2}^2)^2 + \right.$$
$$\left. + \frac{9}{8}(\hat{\sigma}_{1,2}^2) + \frac{67}{32}\right\} - H_z g\mu_B \hat{\sigma}_{12z}, \qquad (22)$$

где H_z — напряженность магнитного поля, направленного вдоль оси сжатия образца; g — гиромагнитный фактор акцептора; μ_B — магнетон Бора.

Тогда собственное значение энергии системы в магнитном поле имеет вид

$$E = K + A\left\{-\frac{2}{9}(\sigma(\sigma+1))^3 - \frac{11}{18}(\sigma(\sigma+1))^2 + \right.$$
$$\left. + \frac{9}{8}(\sigma(\sigma+1)) + \frac{67}{32}\right\} - H_z g\mu_B \sigma_z. \qquad (23)$$

В этом выражении σ_z — проекция суммарного спина на ось сжатия.

Таким образом, антисимметричные состояния должны расщепиться магнитным полем на пять подуровней с $\sigma_z = 2, 1, 0, -1, -2$, где состояние с $\sigma_z = 0$ останется двукратно вырожденным по полному спину с $\sigma = 2$ и $\sigma = 0$. Наиболее выгодным в этом случае будет состояние с полным спином $\sigma = 2$ и его максимальной проекцией $\sigma_z = 2$, то есть антисимметричное магнитное состояние.

Итак, учет парного взаимодействия дырок, характеризующихся спином 3/2 и принадлежащих разным центрам (акцепторам), приводит к формированию антисимметричного антиферромагнитного основного состояния, которое является вырожденным по значению суммарного спина. Иными словами, пары акцепторов, расположенные вдоль оси сжатия, могут находиться в состоянии с полным спином, равным нулю, и в состоянии со спином, равным двум, либо в их суперпозиции. Для основного состояния пар акцепторов характерна фрагментация. Включение магнитного поля вдоль оси сжатия приводит к частичному снятию вырождения по проекции полного спина на указанную ось. Наиболее выгодным будет магнитное антисимметричное состояние со значением суммарного спина $\sigma = 2$ и его проекции $\sigma_z = 2$. Таким образом, из акцепторов будут формироваться области с локальной

намагниченностью, сонаправленной с осью сжатия, что в соответствии с механизмом Бира — Аронова — Пикуса приведет к увеличению проводимости свободных электронов.

Работа выполнена при финансовой поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (Госконтракт П2326), а также Комитета по науке и высшей школе Правительства Санкт-Петербурга (гранты 2008 и 2010 годов для студентов и аспирантов вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Аверкиев, Н.С.** Гигантское отрицательное магнетосопротивление в одноосно деформированном антимониде индия, легированном марганцем [Текст] / Н.С. Аверкиев, В. Гай, С.А. Обухов [и др.] Письма в ЖЭТФ.— Т. 40.— Вып. 2.— С. 45–47.

2. **Altshuler, B.L.** Anomalous magnetoresistance in semiconductors [Text] / B.L. Altshuler, A.G. Aronov, A.T. Larkin [et al.] // ЖЭТФ.—1981.— Т. 81.— С. 768–783.

3. **Henriques, A.B.** Giant negative magnetoresistance in a nonmagnetic semiconductor [Text] / A.B. Henriques, S.A. Obukhov, N.F. Yr. Oliveira [et al.] // Письма в ЖЭТФ.— 1999.— Т. 69, № 5.— С. 358–362.

4. **Albuquerque, A.F.** Quantum phase diagram and excitations for the one-dimensional $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet with single-ion anisotropy [Text] / A.F. Albuquerque, C.J. Hamer, J. Oitmaa // Phys. Rev. B. 2009.—Vol. 79.— P. 054412.

5. **Affleck, I.** Rigorous results on valence-bond ground state in antiferromagnets [Text] / I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 1987.— Vol. 59.— № 7.— P. 799–802.

6. **Haldane, F.D.N.** Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Neel state. [Text] / F.D.N. Haldane // Phys. Rev. Lett.— 1983.— Vol. 50. № 15.— P. 1153–1156.

7. **Orlenko, E.** The universal Hamiltonian of the exchange interaction for the system of particles with an arbitrary spin j [Text] / E. Orlenko // Intern. J. of Quant. Chem.— 2007.— Vol. 107.— P. 2838–2843.

8. **Орленко, Е.В.** Нелинейные магнитные явления в конденсате Бозе–Эйнштейна [Текст] / Е.В. Орленко, И.Е. Мазец, Б.Г. Матисов // ЖТФ-2003.— Vol. 73. № 1.— P. 30–37.

УДК 621.383.8:537.313

В.М. Емельянов, Н.А. Калюжный, М.А. Минтаиров, С.А. Минтаиров, М.З. Шварц, В.М. Лантратов

ОПТИМИЗАЦИЯ КОНЦЕНТРАТОРНЫХ ТРЕХПЕРЕХОДНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

На сегодняшний день наибольшие значения коэффициента полезного действия были достигнуты для солнечных элементов (СЭ) на основе гетероструктуры GaInP/GaInAs/Ge при коэффициенте концентрирования солнечного света 300–500× [1]. Использование в солнечных батареях оптических концентраторов с высокой кратностью концентрирования позволяет повысить кпд СЭ и снизить стоимость батареи за счет уменьшения площади самой дорогостоящей составной части батареи — солнечного элемента. При этом, однако, становятся значимыми омические потери мощности, вызванные токами, протекающими в структуре СЭ в латеральном направлении; такие токи увеличиваются пропорционально квадрату кратности концентрирования [2]. Данный фактор становится еще более существенным, если учитывать, что распределение освещенности в фокальном пятне оптических концентраторов высокой кратности бывает, как правило, неравномерным. Так, для линзы Френеля, которая обеспечивает среднюю кратность концентрирования 400–500× при ограничении поля по уровню 0,95 полной мощности, кратность концентрирования в точке максимума освещенности может достигать 1500–2500× [3, 4].

Вследствие того, что передний контакт СЭ не является сплошным, для попадания во внешнюю цепь фотогенерированным носителям заряда в эмиттере верхнего субэлемента необходимо преодолеть некоторое расстояние до ближайшей контактной шинки параллельно плоскости *p*—*n*-перехода. Это приводит к возникновению латеральных токов в верхнем субэлементе многопереходного СЭ. В остальных субэлементах токи растекания возникают при наличии хроматической аберрации в линзовом концентраторе. Омические потери, вызванные данными токами, можно снизить путем увеличения уровней легирования и толщины слоев, в которых происходит растекание тока. Однако повышение уровней легирования влечет за собой снижение диффузионных длин неосновных носителей заряда (ННЗ) в фотоактивных слоях; этот эффект в сочетании с увеличением толщин слоев может приводить к ослаблению генерации фототока в элементе и снижению кпд. Таким образом, оптимизация толщин и уровней легирования слоев — это многофакторная задача, так как изменяемые параметры одновременно влияют на различные по физической природе механизмы потерь в СЭ.

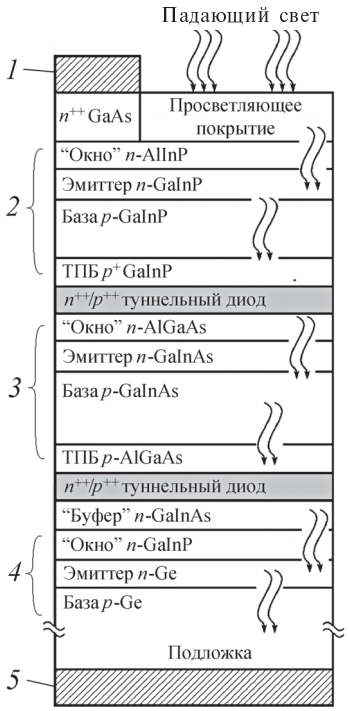


Рис. 1. Структура исследуемого солнечного элемента (СЭ) GaInP/GaInAs/Ge:
1 – контактная сетка,
2–4 – субэлементы GaInP, GaInAs и Ge соответственно,
5 – тыльный контакт

Цель данной работы состояла в определении оптимальных толщин и уровней легирования фотоактивных слоев структур трехпереходных СЭ GaInP/GaInAs/Ge, имеющих различные значения параметров (кратность концентрирования солнечного света, шаг контактной сетки и величина хроматической аберрации в линзовом концентраторе).

Вольтамперные характеристики исследуемых концентраторных солнечных элементов

Омические потери. Указанные потери в многопереходных СЭ GaInP/GaInAs/Ge приводят к уменьшению фактора заполнения вольтамперной характеристики (ВАХ) и снижению кпд. К ним относятся следующие потери:

на последовательном сопротивлении подложки;

в контактной сетке;

в сопротивлениях контактов металл — полупроводник;

в туннельных переходах;

вызванные токами растекания под контактной сеткой;

те же между субэлементами многопереходного СЭ.

Наиболее существен отрицательный вклад в величину кпд СЭ двух последних видов потерь.

Омические потери в СЭ вследствие протекания латеральных токов удобно связать со свойствами структуры элемента при помощи характеристической величины — сопротивления растеканию слоя. Ее можно представить как отношение удельного сопротивления слоя ρ к его толщине *d*:

$$R_{\text{р}} = \rho / d. \qquad (1)$$

В этом случае оно будет означать величину падения напряжения на единицу длины структуры при протекании в слое тока амплитудой 1 А через участок шириной 1 см в латеральном направлении.

В пределах каждого субэлемента латеральные токи протекают преимущественно вдоль слоя с наименьшим сопротивлением растеканию. На рис. 1 приведена структура типичного СЭ GaInP/GaInAs/Ge [5]; в таблице представлены результаты расчета сопротивлений растеканию

Значения сопротивлений растеканию в слоях типичного трехпереходного солнечного элемента (см. рис. 1)

Структурный элемент	Слой	Толщина, мкм	Концентрация примеси, $см^{-3}$	Сопротивление растеканию, Ом
Субэлемент GaInP	«Окно» *n*-AlInP	~0,03	$(1–5)\cdot10^{18}$	$(0,3–1,5)\cdot10^{4}$
	Эмиттер *n*-GaInP	0,03–0,10	$(0,1–1)\cdot10^{19}$	$(0,25–5)\cdot10^{3}$
	База *p*-GaInP	0,3–0,8	$(1–2)\cdot10^{17}$	$(1,0–5,5)\cdot10^{4}$
	Тыльный потенциальный барьер (ТПБ) p^{+}-GaInP	0,05–0,10	$2\cdot10^{18}$	$(0,5–1,2)\cdot10^{3}$
Верхний туннельный диод	p^{++}-$Al_{40}GaAs$	0,01–0,02	$(1–2)\cdot10^{19}$	$(0,4–1,5)\cdot10^{3}$
	n^{++}-GaAs	0,01–0,02	$(2–5)\cdot10^{19}$	100–300
Субэлемент GaInAs	«Окно» *n*-$Al_{80}GaAs$	0,03–0,10	$(1–3)\cdot10^{18}$	$(0,1–2,5)\cdot10^{4}$
	Эмиттер *n*-GaInAs	0,05–0,20	$(1–4)\cdot10^{18}$	50–500
	База *p*-GaInAs	2,5–3,5	$(1–4)\cdot10^{17}$	200–900
	ТПБ *p*-GaInP	0,05–0,10	$2\cdot10^{18}$	$(0,5–1,20)\cdot10^{3}$
Нижний туннельный диод	*p*-AlInP	0,03–0,05	$(1–5)\cdot10^{18}$	$(0,5–6)\cdot10^{4}$
	p^{++}-$Al_{40}GaAs$	0,01–0,02	$(1–2)\cdot10^{19}$	$(0,4–1,5)\cdot10^{3}$
	n^{++}-GaAs	0,01–0,02	$(2–5)\cdot10^{19}$	100–300
	n-AlInP	0,03–0,05	$(1–5)\cdot10^{18}$	$(0,2–1,5)\cdot10^{4}$
Субэлемент Ge	«Буфер» *n*-GaInAs	1–2	$(1–2)\cdot10^{18}$	7–30
	«Окно» *n*-GaInP	0,03–0,15	$(1–4)\cdot10^{17}$	$(0,15–2,00)\cdot10^{4}$
	Эмиттер *n*-Ge	0,1–0,8	$\sim2\cdot10^{18}$	70–500
	База *p*-Ge	~200	$(1–5)\cdot10^{17}$	0,75–2,50

в различных слоях структуры (данные о величинах удельного сопротивления слоев взяты из [6–10]).

Из анализа таблицы следует, что в Ge-субэлементе буферный слой имеет сопротивление растеканию не более 30 Ом. В работе [11] было показано, что при средней кратности концентрирования излучения 500× потери кпд вследствие протекания латеральных токов между субэлементами становятся ощутимыми при сопротивлениях растеканию в соответствующих слоях 100 Ом и более. По этой причине оптимизация толщин слоев Ge-субэлемента для снижения омических потерь в реальных GaInP/GaInAs/Ge СЭ не является приоритетной. В субэлементах GaInP и GaInAs латеральные токи протекают преимущественно в эмиттерах, поэтому при оптимизации варьируемыми параметрами будут толщины и уровни легирования данных слоев.

Трехмерная распределенная модель. Моделирование ВАХ многопереходного СЭ с учетом омических потерь (вызваны протеканием латеральных токов) в слоях можно выполнить либо путем использования эквивалентной схемы с сосредоточенными параметрами и нелинейным последовательным сопротивлением, либо путем построения распределенной эквивалентной схемы [2, 12]. Второй подход предпочтителен, так как позволяет описывать реальные физические процессы, протекающие в элементе, а также получать единую электрическую модель для любых кратностей концентрирования света (в случае первого подхода вид ВАХ будет различным для различных значений фототока СЭ).

Для учета токов растекания и эффектов, с ними связанных, была использована трехмерная распределенная эквивалентная схема, образованная последовательно-параллельным соединением множества элементарных ячеек, каждая из которых описывала определенную зону субэлемента, туннельного диода или контактной сетки СЭ GaInP/GaInAs/Ge (рис. 2) и была узлом трехмерной схемы [11]. Эквивалентные схемы, наиболее близкие к данной, были предложены в работе [12], однако, они, во-первых, были

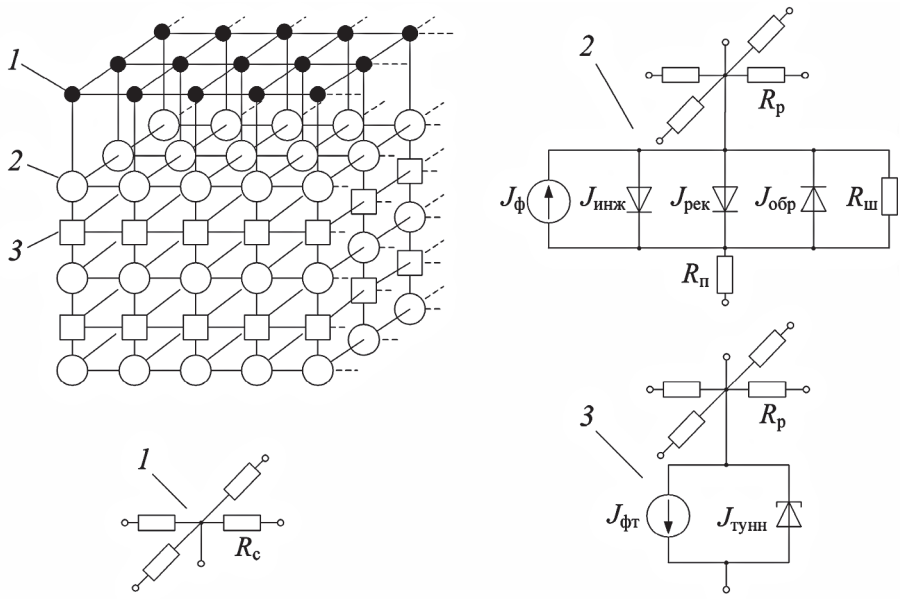


Рис. 2. Распределенная эквивалентная схема исследуемого СЭ и ее элементарные ячейки, описывающие контактную сетку (*1*), субэлемент (*2*), туннельный диод (*3*).
Обозначения даны в тексте

ориентированы на однопереходные СЭ, а, во-вторых, не учитывали формы обратных ветвей ВАХ фотоактивных *p*—*n*-переходов.

В используемой модели вольтамперная характеристика каждого фотоактивного *p*—*n*-перехода многопереходного СЭ описывается формулой

$$J(V) = J_ф - J_{инж}\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - J_{рек}\exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) + \\ + J_{обр}\exp\left(-\frac{qV}{A_{обр}kT}\right) - \frac{V}{R_ш}, \qquad (2)$$

где $J_ф$ — фототок субэлемента, $J_{инж}$, $J_{рек}$ — плотности инжекционного и рекомбинационного токов в *p*—*n*-переходе; $J_{обр} = J_{инж} + J_{рек}$ — плотность тока в обратной ветви ВАХ *p*—*n*-перехода; $A_{обр}$ — показатель идеальности обратной ветви ВАХ; q — заряд электрона; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; $R_ш$ — шунтирующее сопротивление.

ВАХ туннельного диода выражается через его фототок $J_{фт}$ и темновую ВАХ $J_{туннн}(V)$:

$$J(V) = J_{туннн}(V) - J_{фт}. \qquad (3)$$

Отдельные ячейки эквивалентной схемы, которые описывают фрагменты субэлементов и туннельных диодов, соединяются посредством резисторов $R_р$ и $R_п$, моделирующих омические потери при протекании в структуре токов в латеральном и нормальном направлениях, соответственно. Контактная сетка моделируется при помощи резисторов $R_с$.

Особенности использованной модели — это одновременный независимый учет всех частей структуры многопереходного СЭ, введение в эквивалентную схему субэлемента встречно включенного диода, а также учет фототока, генерируемого в туннельном диоде. Встречно включенный диод позволяет учитывать форму обратной ветви ВАХ, которая способна оказывать существенное влияние на ВАХ многопереходного СЭ при рассогласовании фототоков его субэлементов. Фотоэффект в туннельном диоде может играть заметную роль при высоких кратностях концентрирования и приводить к снижению напряжения холостого хода и фактора заполнения ВАХ солнечного элемента [13].

Определение оптимальных параметров структуры

Влияние параметров структуры на генерацию тока и сопротивление растеканию в эмиттерах субэлементов GaInP и GaInAs. При помощи трех-

мерной распределенной модели были рассчитаны зависимости доли собираемых неосновных носителей заряда от уровня легирования и толщины эмиттера для субэлементов GaInP и GaInAs солнечных элементов GaInP/GaInAs/Ge (рис. 3) с использованием метода, предложенного в статье [14]. Учет изменения диффузионной длины ННЗ производился по формуле

$$L_p = C_3 \left(N_d \right)^{-1/2}, \qquad (4)$$

где коэффициент C_3 для n-GaInP был равен $1{,}51 \cdot 10^4$ см$^{-1/2}$, а для n-GaInAs — $3{,}54 \cdot 10^4$ см$^{-1/2}$.

Данные зависимости типичны для структур GaInP/GaInAs/Ge, получаемых в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.

Диаграммы на рис. 3 наглядно показывают, что с увеличением толщины эмиттера или уровня его легирования доля собираемых ННЗ сокращается. Также на диаграммы нанесены линии равных значений сопротивлений растеканию в эмиттерах. При расчете сопротивления растеканию для различных толщин и уровней легирования эмиттеров субэлементов GaInP и GaInAs использовалась следующая формула, аппроксимирующая экспериментальные зависимости удельного сопротивления материала [6, 7]:

$$\rho = \frac{(1 + C_1 N_d)^{1/3}}{C_2 N_d}, \qquad (5)$$

где N_d — концентрация донорной примеси в эмиттере; C_1, C_2 — эмпирические коэффициенты.

Для n-GaInP значения коэффициентов составили: $C_1 = 2{,}0 \cdot 10^{-17}$ см^3, $C_2 = 2{,}2 \cdot 10^{-16}$ см$^2 \cdot$Ом$^{-1}$; для n-GaInAs — $C_1 = 10^{-17}$ см^3, $C_2 = 10^{-15}$ см$^2 \cdot$Ом$^{-1}$.

По диаграммам на рис. 3 можно найти максимально достижимую долю собираемых ННЗ для каждого значения сопротивления растеканию. Данные зависимости представлены на рис. 4. Видно, что для обоих субэлементов указанная величина растет с увеличением сопротивления растеканию, при этом существует некоторое пороговое значение сопротивления, при котором достигается почти полное собирание ННЗ и выше которого уже не наблюдается роста фототока.

Влияние параметров структуры на кпд СЭ. Для оценки такого влияния в субэлементе GaInP было произведено моделирование ВАХ солнечного элемента GaInP/GaInAs/Ge при различных кратностях концентрирования света и величинах сопротивления растеканию в эмиттере субэлемента. Для моделирования за основу был взят СЭ с характеристиками, близкими к предельным для СЭ рассматриваемого типа, согласованных по параметру решетки [15]. Для наземного излучения AM1.5D плотность фототока составляла 14,7 мА$\cdot$см$^{-2}$, напряжение холостого хода — 2,69 В, кпд — 34 %. Данные характеристики достигались при сопротивлении растеканию 5 кОм в субэлементе GaInP.

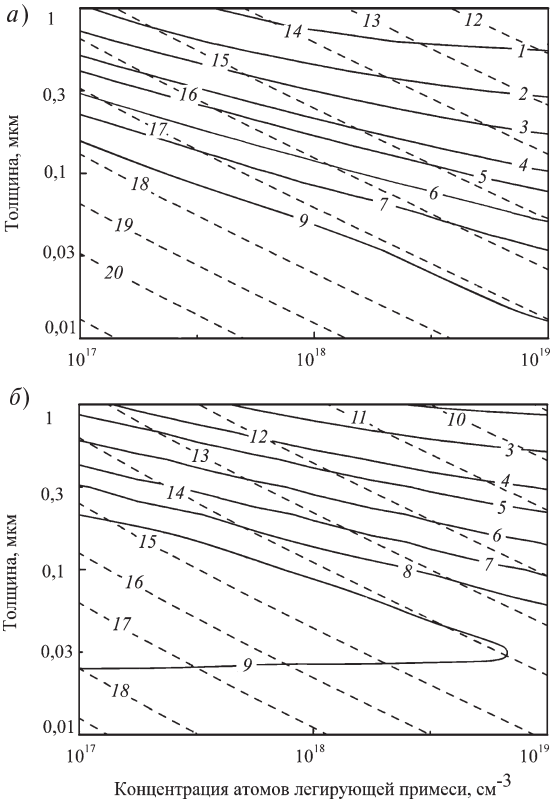


Рис. 3. Изолинии долей собираемых ННЗ (*1–9*) и значений сопротивления растеканию (*10–20*) в эмиттерах субэлементов GaInP (*а*) и GaInAs (*б*) в зависимости от их толщин и уровней легирования.

Доля, %: 10(*1*), 30(*2*), 50(*3*), 70(*4*), 80(*5*), 90(*6*), 95(*7*), 97(*8*), 98(*9*); сопротивление, Ом: 10(*10*), 20(*11*), 50(*12*), 100(*13*), 200(*14*), 500(*15*), 10^3(*16*), $2 \cdot 10^3$(*17*), $5 \cdot 10^3$(*18*), 10^4(*19*), $2 \cdot 10^4$(*20*)

На основе полученных ВАХ были построены зависимости максимально достижимого кпд в СЭ и соответствующих ему оптимальных значений сопротивления растеканию от кратности концентрирования (рис. 5). Там же приведены зависимости кпд от кратности концентрирования света при сопротивлении растеканию 5 кОм.

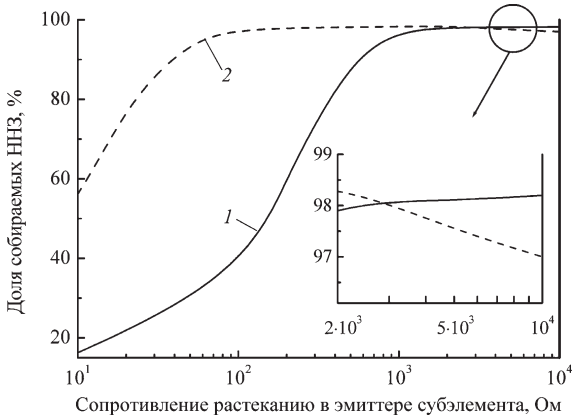


Рис. 4. Максимально достижимые доли собираемых НН3 в субэлементах GaInP (*1*) и GaInAs (*2*) в зависимости от величины сопротивления растеканию в их эмиттерах.

На вставке — увеличенный фрагмент графика для области высоких значений сопротивления

По мере увеличения кратности концентрирования происходит уменьшение оптимального значения сопротивления растеканию и увеличивается разность между значениями кпд, достигаемыми при оптимальном сопротивлении растеканию и равном 5 кОм. Если выбирать значения сопротивления растеканию, оптимальные для неконцентрированного света, то максимальный кпд оказывается ниже на 1,0–1,5 %, и он достигается при меньших кратностях концентрирования. Если же последние соответствуют максимуму кпд оптимизированного СЭ, то неоптимизированный обладает на 1,5–4,0 % меньшей эффективностью.

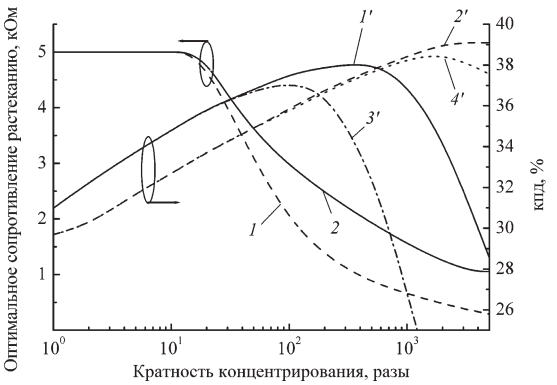


Рис. 5. Зависимости оптимальных значений сопротивления растеканию в эмиттере субэлемента GaInP (*1*,*2*) и кпд исследуемого СЭ (*1′*–*4′*) от кратности концентрирования при варьировании других параметров.

Шаг контактной сетки, мкм: 200 (*1*,*1′*,*3′*) и 50 (*2*,*2′*,*4′*); затенение, %: 8 (*1*,*1′*,*3′*) и 12 (*2*,*2′*,*4′*); сопротивление растеканию: оптимальное (*1′*,*2′*) и 5 кОм (*3′*,*4′*)

В том случае, когда в концентраторе есть хроматическая аберрация , на кпд СЭ может оказывать влияние сопротивление растеканию не только в эмиттере субэлементаGaInP, но и субэлемента GaInAs. В связи с этим были рассчитаны зависимости потерь кпд в СЭ вследствие хроматической аберрации в концентраторе, значений сопротивления растеканию, обеспечивающих максимальный кпд, и потерь кпд при сопротивлении растеканию, оптимальном для неконцентрированного освещения (рис. 6). Моделирование было выполнено для двух значений коэффициента хроматической аберрации, который рассчитывался по следующей интегральной формуле:

$$K_{\mathrm{a}} = \frac{\int\limits_{\mathbf{r}\in S} dS(\mathbf{r})\, H\left(\Delta j(\mathbf{r})\right) \int\limits_{\mathbf{r}'\in S} H\left(-\Delta j(\mathbf{r}')\right)\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right| dS(\mathbf{r}')}{\int\limits_{\mathbf{r}'\in S} H\left(-\Delta j(\mathbf{r}')\right) dS(\mathbf{r}')} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{2} \int\limits_{\mathbf{r}\in S} \left(j_{\mathrm{GaInP}}(\mathbf{r}) + j_{\mathrm{GaInAs}}(\mathbf{r}) \right) dS(\mathbf{r}) \right)^{-1}, \qquad (6)$$

где $j_{\mathrm{GaInP}}(\mathbf{r})$, $j_{\mathrm{GaInAs}}(\mathbf{r})$ — плотности фототока субэлементов GaInP и GaInAs; $\Delta j(\mathbf{r}) = j_{\mathrm{GaInP}}(\mathbf{r}) - j_{\mathrm{GaInAs}}(\mathbf{r})$ — их разность; S — площадь элемента; $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ — радиусы-векторы точек субэлементов; $H(x)$ — функция Хевисайда.

Вводимый формулой (6) коэффициент хроматической аберрации фактически отражает отношение тока, которому необходимо пройти расстояние 1 см в латеральном направлении для замыкания цепи между двумя субэлементами, к среднему фототоку данных субэлементов многопереходного СЭ.

Из рис. 6 видно, что оптимальные значения сопротивления растеканию убывают с ростом кратности концентрирования. При этом в некотором диапазоне концентраций оптимизация данной величины позволяет снизить потери кпд от хроматической аберрации в линзовом концентраторе до 0,3 %. При больших значениях кратности указанная оптимизация не позволяет получить заметного увеличения кпд, так как падение фототока при уменьшении сопротивления растеканию в эмиттере оказывается более существенным, чем сокращение омических потерь.

Таким образом, в данной работе было исследовано влияние параметров структуры концен-

траторных СЭ GaInP/GaInAs/Ge на эффективность преобразования ими солнечного света. Показана возможность снижения омических потерь, вызванных протеканием латеральных токов в структуре, путем оптимизации толщин и уровней легирования эмиттеров субэлементов GaInP и GaInAs.

Предложена количественная оценка величины хроматической аберрации для концентратора, фокусирующего свет на многопереходный СЭ. Определены оптимальные значения сопротивления растеканию в эмиттерах субэлементов GaInP и GaInAs трехпереходных СЭ GaInP/GaInAs/Ge, позволяющие добиться максимального кпд при различных кратностях концентрации солнечного света и величинах хроматической аберрации. Произведена оценка влияния величин сопротивлений растеканию на кпд СЭ.

Получены диаграммы для определения толщин и уровней легирования эмиттеров субэлементов GaInP и GaInAs в зависимости от значения сопротивления растеканию в них. При этом были использованы литературные данные и характеристики слоев *n*-GaInP и *n*-GaInAs в структурах СЭ, изготавливаемых в ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Показано, что оптимальный выбор параметров эмиттерных слоев при больших кратностях концентрирования позволяет увеличить кпд СЭ GaInP/GaInAs/Ge до 4 %.

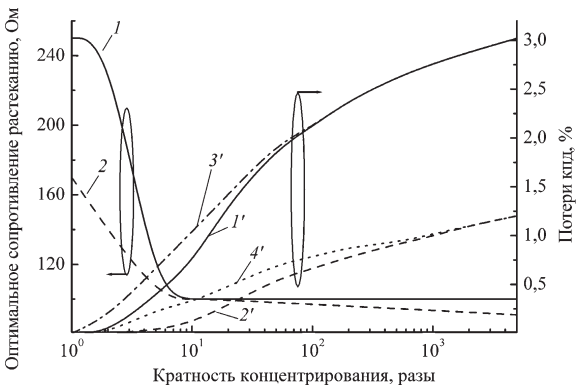


Рис. 6. Зависимости оптимальных значений сопротивления растеканию в эмиттере субэлемента GaInAs (*1*,*2*) и потерь кпд исследуемого СЭ (*1′*–*4′*) от кратности концентрирования при варьировании других параметров.

Коэффициенты хроматической аберрации K_a: 0,05 (*1*,*1′*,*3′*) и 0,10 (*2*,*2′*,*4′*); сопротивление растеканию: оптимальное (*1′*,*2′*), 260 Ом (*3′*) и 170 Ом (*4′*)

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 09-08-00879-а, № 09-08-00954-а, № 10-08-00737-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Guter, W.** Current-matched triple-junction solar cell reaching 41.1 % conversion efficiency under concentrated sunlight [Text] / W. Guter, J. Schoene, S.P. Philipps [et al.] // Appl. Phys. Lett.— 2009.— Vol. 94.— № 22.— P. 223504.

2. **Андреев, В.М.** Фотоэлектрическое преобразование концентрированного солнечного излучения [Текст] / В.М. Андреев, В.А. Грилихес, В.Д. Румянцев.— Л.: Наука, 1989.– 310 с.

3. **Shvarts, M.Z**. Flat-plate Fresnel lenses with improved concentrating capabilities: Designing, manufacturing and testing [Text] / M.Z. Shvarts, V.M. Andreev, V.S. Gorohov [et al.] // Proc. of the 33rd IEEE PVSC.— San Diego, 2008.— 10.1109/PVSC. 2008. 4922751.

4. **Andreev, V.M.** Weakening of the chromatic aberration negative effect on the performance of concentrator multi-junction solar cells [Text] / V.M. Andreev, V.A. Grilikhes, A.A. Soluyanov [et. al.] // Proc. of the 22nd EPSEC.— Milan, 2007.– P. 126–131.

5. **Takamoto, T.** Group III-V solar cell [Text] / T. Takamoto // Пат. 20030136442A1 US, Int. CI.7 H 01 L 31/00.

6. **Shitara, T.** Electronic properties of InGaP grown by solid source molecular beam epitaxy with a GaP decomposition source [Text] / T. Shitara, K. Eberl // Appl. Phys. Lett.— 1994.— Vol. 65.— № 3.– P. 356–358.

7. **Ikeda, M.** Selenium and zinc doping in $Ga_{0.5}In_{0.5}P$ and $(Al_{0.5}Ga_{0.5})_{0.5}In_{0.5}P$ grown by metalorganic chemical vapor deposition [Text] / M. Ikeda, K. Kaneko // J. Appl. Phys.— 1989.— Vol. 66.— № 11.– P. 5285–5289.

8. **Saxena, A.K.** Electron mobility in $Ga_{1-x}Al_xAs$ alloys [Text] / A.K. Saxena // Phys. Rev.— 1981.— Vol. B24.— № 6.— P. 3295–3302.

9. **Cuttris, D.B.** Relation between surface concentration and average conductivity in diffused layers in germanium [Text] / D.B. Cuttris // Bell Syst. Techn. J.— 1961.— Vol. 40.— № 2.— P. 509–523.

10. **Liu, W.K.** Thin films: Heteroepitaxial systems. Series on directions in condensed matter physics[Text]: Vol. 15. Ed. by W.K. Liu, M. Banzon Santos.— Singapore: World Sciencific, 1999.— 663 p.

11. **Emelyanov, V.M.** Distributed resistance effects simulation in concentrator MJ SCs using 3D-network model [Text] / V.M. Emelyanov, N.A. Kalyuzhnyy,

M.A. Mintairov [et al.] // Proc. of the 25th EPSEC.— Valencia, 2010.— P. 1DV.2.33.

12. **Galiana, B.** Explanation for the dark I–V curve of III–V concentrator solar cells [Text] / B. Galiana, C. Algora, I. Rey-Stolle // Progress in Photovoltaics: Research and application.— 2008.— Vol. 16.— № 4.— P. 331–338.

13. **Минтаиров, М.А.** Особенности фотовольтаических характеристик и эквивалентные схемы многопереходных наногетероструктурных InGaP/GaAs/Ge монолитных солнечных элементов [Текст] / М.А. Минтаиров, В.В. Евстропов, Н.А. Калюжный [и др.] // Тез. докл. 2-го международного конкурса научных работ молодых ученых в области нанотехнологий.— Москва, 2009.— С. 86.

14. **Емельянов, В.М.** Внешний квантовый выход фотоответа каскадных солнечных элементов [Текст] / В.М. Емельянов, С.А. Минтаиров, Н.А. Калюжный, В.М. Лантратов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.– 2009.– № 1 (77).— С. 14–23.

15. **Bett, A.W.** Highest efficiency multi-junction solar cell for terrestrial and space applications [Text] / A.W. Bett, F. Dimroth, W. Guter [et al.] // Proc. 24th EPSEC.— Hamburg, 2009.— P. 1AP.1.1.

УДК 538.945

М.А. Зеликман, К.А. Поцелуев

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА НА МЕЙССНЕРОВСКОЕ СОСТОЯНИЕ В ТРЕХМЕРНОЙ УПОРЯДОЧЕННОЙ ДЖОЗЕФСОНОВСКОЙ СРЕДЕ

Эффект Мейсснера, т. е. выталкивание магнитного поля из объема сверхпроводника, имеет место как в обычных, так и в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП). Для обычных сверхпроводников физика этого эффекта понятна, и его теория, базирующаяся на уравнениях Гинзбурга — Ландау, построена еще до создания теории БКШ. В керамических ВТСП теоретическое описание эффекта Мейсснера сталкивается с некоторыми трудностями, которые вызваны гранулированностью образцов. В первую очередь эти трудности связаны с ячеистой структурой среды, когда между соприкасающимися сверхпроводящими гранулами находятся диэлектрические области. В местах соприкосновения гранул друг с другом образуются джозефсоновские контакты, количество которых так велико, что такие среды иногда называют джозефсоновскими. Указанные контакты являются нелинейными элементами, что сильно усложняет анализ таких сред. Токовые состояния — как экранирующие, так и вихревые, отличаются по своей структуре от существующих в обычных сверхпроводниках. Уравнения Гинзбурга — Ландау неприменимы в этой ситуации, и нужно искать другую основу для математического описания гранулированных сверхпроводников.

В работе [1] предложена модель гранулированного ВТСП, в которой в качестве математической основы описания используется система уравнений квантования флюксоида в ячейках. Эта модель представляет собой кубическую решетку, состоящую из сверхпроводящих проводов, каждая связь которой содержит один джозефсоновский контакт. Как показали расчеты, такой модели (ее принято называть трехмерной упорядоченной джозефсоновской средой) присущи все свойства, характерные для сверхпроводников во внешнем магнитном поле: мейсснеровские экранирующие токи, взаимодействующие друг с другом вихри, набор характерных полей и т. п., причем даже количественные соотношения аналогичны имеющим место в обычных и высокотемпературных сверхпроводниках. При этом математическое описание, основанное на уравнениях квантования флюксоида в ячейках, позволяет исследовать все детали токовых конфигураций. Поэтому использование этого подхода целесообразно при анализе процессов, происходящих в реальных ВТСП.

Система уравнений, выведенных в работе [1], содержит два безразмерных параметра I и b, смысл которых будет понятен из дальнейшего

изложения. Анализ токовых конфигураций в указанной работе и в дальнейших исследованиях [2, 3 и др.] проводился только для отдельных частных случаев. В статье [1] рассматривались только малые магнитные поля, что позволяло подтвердить применимость предлагаемого математического подхода, но не давало возможности исследовать предельные значения поля, при котором возможно мейсснеровское состояние. В работе [2] анализировался только случай $I \ll 1$, в [3] — только ситуации с $b = 0$.

Целью настоящей работы является анализ мейсснеровского состояния на базе того же математического подхода во всем возможном диапазоне полей и значений параметров I и b.

Основные уравнения

Рассмотрим модель, представляющую собой простую кубическую решетку с постоянной решетки a, состоящую из сверхпроводящих проводов, каждая связь которой содержит один джозефсоновский контакт, причем все контакты имеют малые размеры (т. е. джозефсоновские вихри в них отсутствуют) и обладают одной и той же величиной критического тока J_c. Токовое распределение имеет слоистую структуру, т. е. во всех параллельных плоскостях, перпендикулярных внешнему полю и расположенных на расстоянии a друг от друга, токи распределены идентично.

Пусть образец, имеющий форму толстой пластины, бесконечной в двух направлениях, помещен во внешнее магнитное поле H_e, параллельное плоскости пластины. В образце возникнут экранирующие токи, текущие вдоль его поверхности и замыкающиеся на бесконечности, как это показано на рис. 1. Обозначим величину силы тока, текущего в граничном слое, через J_0. По мере углубления в образец имеем токи J_1, J_2 и т. д. В глубине образца токи равны нулю, что является одним из граничных условий.

Найдем поле этой токовой структуры в точке A, находящейся в одном из слоев. Поместим начало координат в точку A, ось x направим из

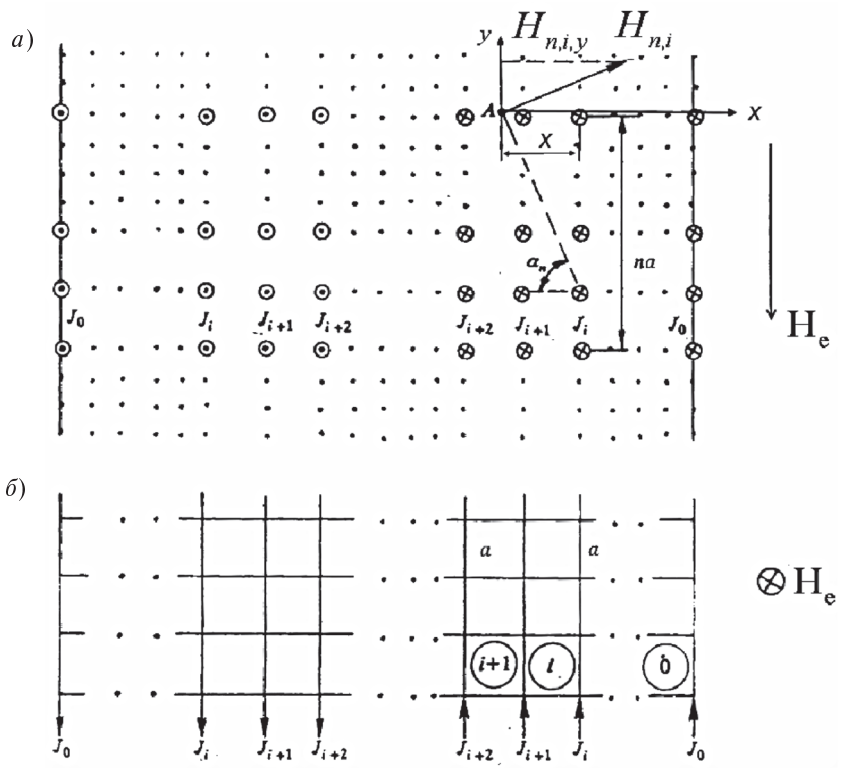


Рис. 1. Распределение экранирующих токов в образце:
а — в плоскости внешнего магнитного поля H_e;
б — в плоскости, перпендикулярной H_e

Точки и крестики в кружках обозначают направление тока в соответствующем проводе; буквы в кружках соответствуют номерам ячеек, используемых при расчетах

образца наружу. Тогда поле, создаваемое в этой точке A линейным бесконечным током J_i, удаленным от слоя точки A на расстояние na, будет равно

$$H_{n,i}(x)=\frac{J_i}{2\pi\sqrt{x^2+(na)^2}}; \qquad (1)$$

$$H_{n,i,y}(x)=H_{n,i}\cos\alpha_n=\frac{J_i x}{2\pi(x^2+n^2a^2)}.$$

Результирующая горизонтальная составляющая поля $H_{i,x}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}H_{n,i,x}$ в точке, принадлежащей одному из слоев, равна нулю, так как токи J_i, расположенные симметрично по обе стороны от этого слоя, вносят вклады в $H_{i,x}$, равные по величине, но противоположные по знаку. В вертикальную же составляющую эти вклады входят с одним знаком, т. е.

$$H_{i,y}=H_{0,i,y}+2\sum_{n=1}^{\infty}H_{n,i,y}=$$

$$=\frac{J_i}{2\pi x}+\frac{J_i}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{x}{(x^2+n^2a^2)}. \qquad (2)$$

Согласно справочнику [4]

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{x}{(x^2+n^2a^2)}=\frac{\pi}{2h}\left(\operatorname{cth}\frac{\pi x}{a}-\frac{a}{\pi x}\right). \qquad (3)$$

Тогда

$$H_{i,y}=\frac{J_i}{2a}\operatorname{cth}\frac{\pi x}{a}. \qquad (4)$$

Учитывая по формуле (4) вклад в поле и от левых частей токов J_i, протекающих с другой стороны образца, при $x>>a$, получим:

$$H_i(x)=\frac{J_i}{2a}\left[1+\operatorname{cth}\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]. \qquad (5)$$

Из этой формулы следует, что в ячейках, не граничащих с токами J_i (т. е. при $|x|>a$), поле можно рассчитывать как поле соленоида, т. е. токи, текущие ближе к центру, не дают вклада в поле, так как $\operatorname{cth}(\pi x/a)\approx -1$ при $x<-a$, а те, что ближе к поверхности, дают вклад $H_i=J_i/a$. Учитывая все токи J_i, получим для поля в m-й ячейке $a\times a$, находящейся между токами J_m и J_{m+1} (номера ячеек указаны в кружках на рис. 1, *б*):

$$H(x)=\sum_{i=0}^{m-1}\frac{J_i}{a}+\frac{J_m}{2h}\left(1+\operatorname{cth}\frac{\pi x}{a}\right)+$$

$$+\frac{J_{m+1}}{a}\left(1-\operatorname{cth}\frac{\pi(a-x)}{a}\right), \qquad (6)$$

где x — расстояние вдоль оси x от точки A до тока J_m.

В каждой из ячеек выполняется условие квантования флюксоида, согласно которому сумма скачков фазы по замкнутому контуру с джозефсоновскими контактами должна равняться нормированному магнитному потоку через контур. Для рассматриваемой мейсснеровской конфигурации оно примет вид

$$2\pi\Phi_m/\Phi_0+\varphi_m-\varphi_{m+1}=0, \qquad (7)$$

где Φ_0 — квант магнитного потока; Φ_m — полный магнитный поток через m-ю ячейку; φ_i — разность фаз на i-м контакте, так что

$$J_i=J_c\sin\varphi_i. \qquad (8)$$

Магнитный поток Φ_m выражается как

$$\Phi_m=\mu_0(a-2\delta)\int_{\delta}^{a-\delta}H(x)dx=$$

$$=\mu_0(a-2\delta)^2\left(\sum_{k=1}^{m}\frac{J_k}{a}+\frac{b}{a}(J_{m-1}-J_m)-H_e\right), \qquad (9)$$

где

$$b=\frac{1}{2\pi(1-2\delta/a)}\ln\frac{1-\exp(-2\pi(1-\delta/a))}{1-\exp(-2\pi\delta/a)}. \qquad (10)$$

Безразмерный параметр b, который мы будем называть структурным фактором, связан с неоднородностью поля в ячейках из-за дискретности распределения токов вдоль оси y. Если бы поле было однородным, то параметр b равнялся бы нулю. Такая ситуация реализуется в искусственной структуре, созданной из сверхпроводящих нитей, склеенных между собой по всей длине, так что джозефсоновскими контактами

являются поверхности соединения нитей, а внешнее поле направлено вдоль нитей. В рассматриваемой же нами геометрии b никогда не обращается в нуль. На рис. 2, *а* приведен график зависимости параметра b от δ / a.

Подставив выражения (8) и (10) в формулу (9), получим уравнение

$$2\pi h - I\sum_{i=0}^{m}\sin\varphi_i - (bI\sin\varphi_m + \varphi_m) + \\ + (bI\sin\varphi_{m+1} + \varphi_{m+1}) = 0, \qquad (11)$$

где $I = 2\pi\mu_0(a-2\delta)^2 J_c / a\Phi_0$ — параметр пиннинга; $h = H_e / H_0$ — нормированная напряженность внешнего магнитного поля; $H_0 = \Phi_0 / \mu_0 S$ — значение внешнего поля, при котором через каждую ячейку площадью $S = (a-2\delta)^2$ проходит один квант магнитного потока Φ_0.

Вычтем из уравнения (11) аналогичное уравнение для $(m-1)$-й ячейки; тогда получим систему

$$(bI\sin\varphi_{m+1} + \varphi_{m+1}) - 2(bI\sin\varphi_m + \varphi_m) + \\ + (bI\sin\varphi_{m-1} + \varphi_{m-1}) = I\sin\varphi_m, \qquad (12)$$

где $m \geq 1$.

Граничным условием к системе (12) является условие (11) при $m = 0$:

$$2\pi h - I\sin\varphi_0 - \\ - (bI\sin\varphi_0 + \varphi_0) + (bI\sin\varphi_1 + \varphi_1) = 0. \qquad (13)$$

Анализ решений системы (12) и условия (13) в работе [3] проводился только для случая $b = 0$. Мы же будем искать решение во всем диапазоне значений параметра b.

Случай малых скачков фазы. Рассмотрим ситуацию, в которой скачки фазы на всех контактах, кроме ближайших к границе, малы, т. е. когда $\sin\varphi_i \approx \varphi_i$ для $i > 0$. Тогда система уравнений (12) принимает вид

$$\varphi_{m+1} - (2+g)\varphi_m + \varphi_{m-1} = 0, \ m \geq 2; \qquad (14)$$

$$\varphi_2 - (2+g)\varphi_1 + \varphi_0 = gb(\varphi_0 - \sin\varphi_0), \qquad (15)$$

где

$$g = I / (Ib+1) = 1 / (b + 1/I). \qquad (16)$$

Величина g представляет собой «эффективное» значение параметра пиннинга. График зависимости параметра g от величины b приведен на рис. 2, *б*. При изменении параметра I гиперболу надо передвигать горизонтально, так чтобы график пересекал ось g в точке I.

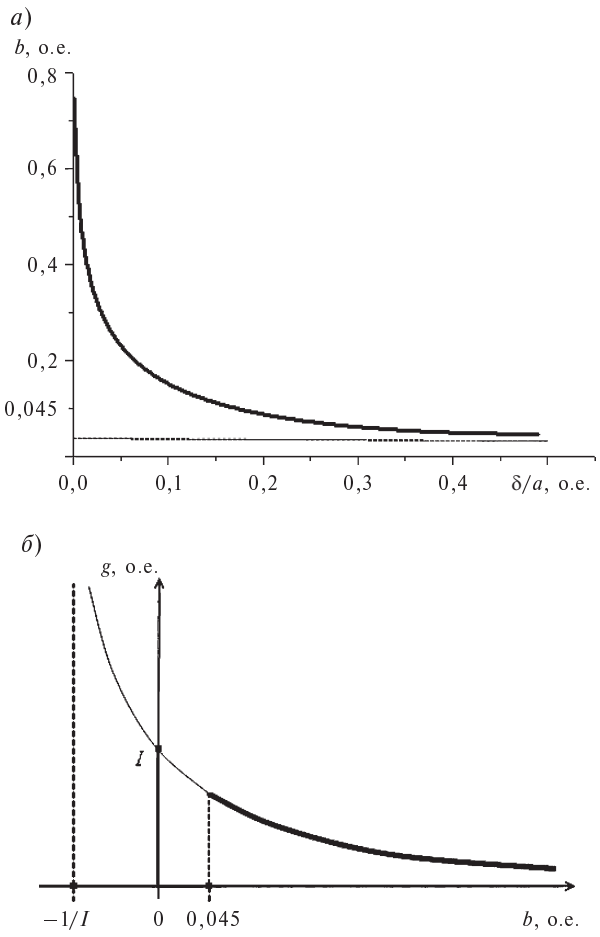


Рис. 2. Зависимости параметра b от величины δ/a (*а*) и параметра g от величины b (*б*); I — параметр пиннинга

Система разностных уравнений с постоянными коэффициентами (14) имеет решение вида

$$\varphi_m = C\gamma^{m-1} + C_1\gamma_1^{m-1}, \qquad (17)$$

где $m \geq 1$; γ, γ_1 — корни характеристического уравнения

$$\gamma^2 - (2+g)\gamma + 1 = 0; \qquad (18)$$

$$\gamma = g/2 + 1 - \sqrt{(g/2)^2 + g}; \qquad (19)$$

$$\gamma_1 = g/2 + 1 + \sqrt{(g/2)^2 + g}.$$

Поскольку $g > 0$, оба корня положительны, но $\gamma < 1$, а $\gamma_1 > 1$. С увеличением номера m второй

член в выражении (17) будет неограниченно возрастать, что противоречит условию отсутствия токов внутри образца. Поэтому $C_1 = 0$ и решение имеет вид

$$\varphi_m = C\gamma^{m-1},\ m \geq 1, \qquad (20)$$

т. е. глубина проникновения может быть определена как $\lambda = -1/\ln\gamma$.

Величины $C = \varphi_1$ и φ_0 найдем из уравнений (13) и (15):

$$\varphi_1 = \gamma\varphi_0 - \gamma g b(\varphi_0 - \sin\varphi_0), \qquad (21)$$

а φ_0 — корень уравнения

$$\sin\varphi_0 = \frac{2\pi h - \varphi_0(1-\gamma)}{I(1+b(1-\gamma))}. \qquad (22)$$

Максимальное значение h, т. е. граница мейснеровской области, находится из условия $\partial h / \partial\varphi_0 = 0$:

$$\cos\varphi_0 = -\frac{1}{I(b+1/(1-\gamma))}. \qquad (23)$$

При $I >> 1$ получим выражения

$$\varphi_0 \approx \frac{\pi}{2} + \frac{1}{I(b+1/(1-\gamma))}; \qquad (24)$$

$$h_{\max} = 0,25(1-\gamma) + \frac{I(1+b(1-\gamma))}{2\pi} + \frac{(1-\gamma)^2}{4\pi I(1+b(1-\gamma))}. \qquad (25)$$

Из анализа рис. 2, *а* можно заключить, что практически значимые величины структурного фактора b, соответствующие области $0,1 \leq \delta/a \leq 0,5$, находятся в диапазоне от $0,150$ до $0,045$. Поэтому при $I \geq 3$ значение параметра $g = 1/(b+1/I)$ больше 2, а соответствующее значение γ меньше $2-\sqrt{3} \approx 0,27$. Тогда из выражения (21) следует, что $\varphi_1 < \gamma\varphi_0 < 0,4$, т. е. условие $\sin\varphi_1 \approx \varphi_1$ выполняется при $I \geq 3$.

Квазинепрерывный случай. При малых значениях параметра I ($I << 1$) величина Ib становится малой, так что ситуация перестает зависеть от структурного фактора b (с точностью до первого порядка по Ib). Тогда система дискретных уравнений (12), (13) примет вид

$$\varphi_{m+1} - 2\varphi_m + \varphi_{m-1} = I\sin\varphi_m,\ m \geq 1; \qquad (26)$$

$$2\pi h = I\sin\varphi_0 + \varphi_0 - \varphi_1. \qquad (27)$$

Получим дифференциальное уравнение, заменяющее систему (26). Для этого рассмотрим функцию $\varphi(\chi)$ (координата χ измеряется в единицах a и отсчитывается от границы внутрь образца), разложим ее в степенной ряд и запишем значения φ_{m+1} и φ_{m-1} в виде

$$\varphi_{m\pm1} = \varphi_m \pm \varphi_m^{\mathrm{I}} + \frac{1}{2}\varphi_m^{\mathrm{II}} \pm \frac{1}{6}\varphi_m^{\mathrm{III}} + \frac{1}{24}\varphi_m^{\mathrm{IV}} + \ldots, \qquad (28)$$

где верхние индексы обозначают порядок производной, взятой по координате χ, а нижний индекс — точку, в которой эти производные вычислены.

Подставив ряд (28) в систему (26), получим

$$\varphi_m^{\mathrm{II}} + \frac{1}{12}\varphi_m^{\mathrm{IV}} + \frac{1}{360}\varphi_m^{\mathrm{VI}} + \ldots = I\sin\varphi_m. \qquad (29)$$

Переходя к переменной $\xi = \chi\sqrt{I}$ и опуская индекс, получим уравнения

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\xi^2} + \frac{I}{12}\frac{\partial^4\varphi}{\partial\xi^4} + \frac{I^2}{360}\frac{\partial^6\varphi}{\partial\xi^6} + \ldots = \sin\varphi. \qquad (30)$$

Из этой системы видно, что с точностью до первого порядка по I система (26) может быть заменена дифференциальным уравнением

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = \sin\varphi, \qquad (31)$$

решение которого при граничном условии $\varphi(0) = \varphi_0$ имеет вид [5]:

$$\varphi = 4\operatorname{arctg}\left[\operatorname{tg}\frac{\varphi_0}{4}\exp(-\xi)\right]. \qquad (32)$$

Универсальная кривая, изображающая это решение при любых значениях φ_0, приведена на рис. 3. Для получения решения с конкретным φ_0 нужно просто разместить границу в том месте кривой, где $\varphi = \varphi_0$.

Значение нормированной напряженности магнитного поля находится из граничного условия (27), которое принимает вид

$$2\pi h = -\varphi_0^{\mathrm{I}} - \varphi_0^{\mathrm{II}}/2 - \varphi_0^{\mathrm{III}}/6 - \ldots + I\sin\varphi_0. \qquad (33)$$

Подставляя в это выражение формулы $\varphi_0^{\mathrm{I}} = -2I^{0,5}\sin(\varphi_0/2)$, $\varphi_0^{\mathrm{II}} = I\sin\varphi_0$, $\varphi_0^{\mathrm{III}} = \varphi_0^{\mathrm{I}} I\cos\varphi_0 =$

$= -2I^{1,5}\cos\varphi_0 \sin(\varphi_0/2)$, полученные из дифференциального уравнения (31) и его решения (32), найдем следующую связь между h и φ_0:

$$2\pi h = 2I^{0,5}\sin(\varphi_0/2) + 0,5I\sin\varphi_0 + $$

$$+ 2I^{1,5}\cos\varphi_0\sin(\varphi_0/2) + \ldots . \qquad (34)$$

Будем искать максимальное значение h и соответствующее значение φ_0^* методом последовательных приближений. В первом приближении считаем

$$2\pi h = 2I^{0,5}\sin(\varphi_0/2),$$

тогда $2\pi h_{\max} = 2I^{0,5}$ при $\varphi_0^* = \pi$.

Во втором приближении считаем $\varphi_0 = \pi - \alpha$ и

$$2\pi h = 2I^{0,5}\sin(\varphi_0/2) + 0,5I\sin\varphi_0 =$$

$$= 2I^{0,5}(1-\alpha^2/8) + 0,5I\alpha .$$

Максимальное значение напряженности поля, при котором существует мейсснеровское решение, достигается при $\alpha = \sqrt{I}$, т. е. при

$$\varphi_0^* = \pi - \sqrt{I}, \qquad (35)$$

и соответствует значению

$$h_{\max} = \sqrt{I}/\pi . \qquad (36)$$

Точное решение. Найдем точное решение системы (12). Введем новую переменную

$$\chi_m = bI\sin\varphi_m + \varphi_m . \qquad (37)$$

Тогда систему (12) можно записать в рекуррентном виде

$$\chi_{m+1} = 2\chi_m - \chi_{m-1} + I\sin\varphi_m . \qquad (38)$$

Для численного решения системы (38) вначале берем произвольное значение φ_0 и пробное значение φ_1, меньшее φ_0. Затем по формулам (37) считаем для этих φ_0, φ_1 значения переменных χ_0, χ_1 и подставляем их в уравнение (38) для $m = 1$. В результате получаем значение χ_2, для которого также должна выполняться формула (37). Решая трансцендентное уравнение (37) при этом значении χ_2, находим значение φ_2. Если оно меньше чем φ_1 в согласии с условием убывания значений φ_m при росте m в мейсснеровском случае, то его можно использовать для

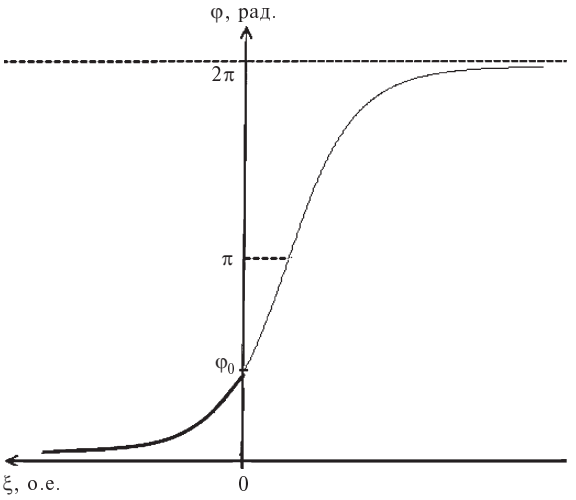


Рис. 3. Универсальная кривая зависимости скачка фазы на контакте от нормированного расстояния от границы в глубь образца

нахождения φ_3, подставляя на этот раз значения χ_1 и χ_2 в уравнение (38) при $m = 2$ и т. д. Если же на каком-то этапе вычисленное значение φ_m не удовлетворяет требованию $\varphi_m < \varphi_{m-1}$, то необходимо изменить пробное значение φ_1 и повторить процедуру. Таким образом, задаваясь разными значениями φ_0, находим соответствующие им возможные значения φ_1, при которых существует решение в виде комбинации значений φ_m, монотонно убывающих при неограниченном росте m. Далее из соотношения (13)

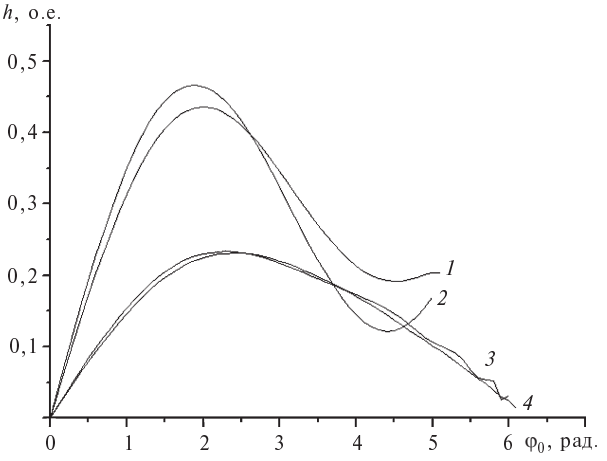


Рис. 4. Зависимости нормированного внешнего магнитного поля от скачка фазы на границе образца при варьировании параметров I, b: I = 1,5(*1,2*); 0,5 (*3,4*); b = 0,049 (*1,3*); 0,454 (*2,4*)

вычисляем соответствующее полученному решению значение нормированной напряженности внешнего магнитного поля h.

Результаты расчетов, их интерпретация и анализ

На рис. 4 приведены графики численно рассчитанных зависимостей $h(\varphi_0)$ для нескольких значений I и b. Начальный участок зависимости до максимума соответствует мейсснеровскому режиму. Максимально возможное значение $h_{\max}$ соответствует величине магнитного поля H_S, выше которой мейсснеровское решение отсутствует.

На рис. 5 приведены графики зависимостей φ_0^*, φ_1^* и $h_{\max}$ от параметра пиннинга I для различных значений структурного фактора b, а также теоретических зависимостей (35) и (36), апп-

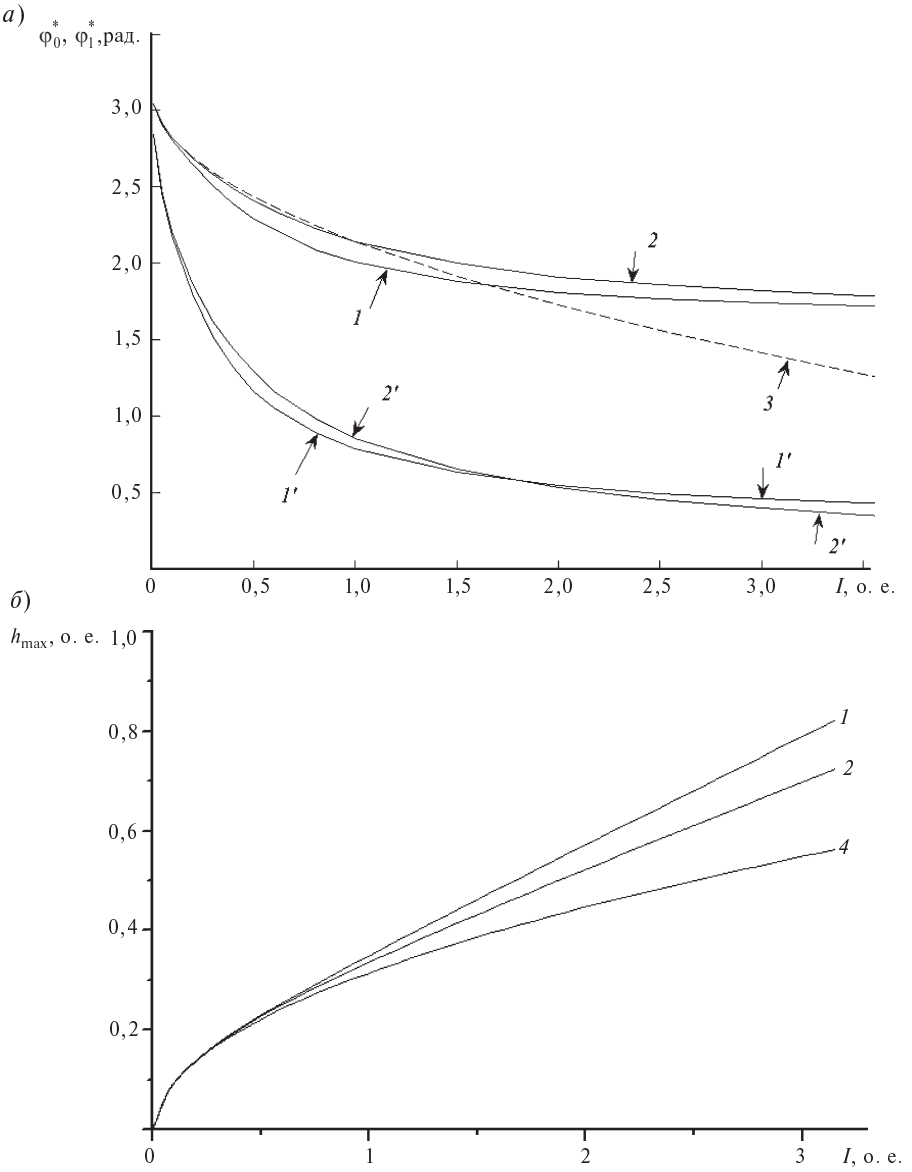


Рис. 5. Графики зависимостей величин φ_0^* (*1–3*), φ_1^* (*1′*, *2′*) (*а*) и $h_{\max}$ (*б*) от параметра пиннинга I для различных значений фактора b: 0,454 (*1*, *1′*); 0,049 (*2*,*2′*).

Для сравнения приведены теоретические зависимости $\varphi_0^* = \pi - \sqrt{I}$ (*3*) и $h_{\max} = \sqrt{I}/\pi$ (*4*) (см. формулы (35), (36))

роксимирующих их при малых значениях параметра I.

При одних и тех же значениях I величина $h_{\max}$ тем больше, чем больше b. Значения φ_0^*, хотя и в меньшей степени зависят от b, но демонстрируют снижение φ_0^* с увеличением b.

Зависимость $\varphi_1^*(I)$ показывает, что для любых реальных b при $I > 2$ условие $\sin\varphi_1^* \approx \varphi_1^*$ выполняется, т. е. справедливо приближение малых скачков фазы.

Кривые, рассчитанные по формуле (25) при соответствующих значениях параметров I и b, практически совпадают с кривыми *1* и *2* на рис. 5, *б* поэтому они на нем не представлены. На рис. 6 приведены относительные отклонения $\delta h = \left|h_{\max} - h_{\text{теор}}\right| / h_{\max}$ результатов компьютерного расчета от теоретических зависимостей (25) и (36). Максимальные отклонения в несколько процентов наблюдаются при значениях I порядка единицы, но в грубом приближении можно утверждать, что при $I < 0,5$ точная зависимость довольно хорошо описывается формулой (36), а при $I > 0,5$ — формулой (25).

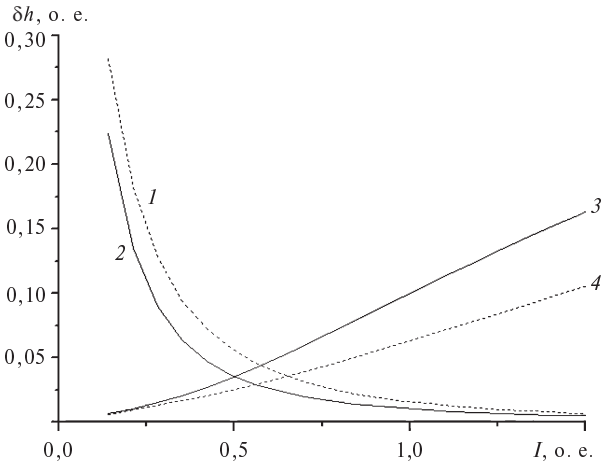


Рис. 6. Относительные отклонения результатов компьютерного расчета от теоретических зависимостей (25) (кривые *1*, *2*) и (36) (кривые *3*, *4*) как функции параметра пиннинга при различных значениях b: 0,049 (*1*,*4*); 0,454 (*2*,*3*)

Итак, получена система разностных уравнений, описывающих токовые конфигурации в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде, основанная на условиях квантования флюксоида в ячейках. Показано, что эта система характеризуется двумя безразмерными параметрами: I и b.

Предложен метод точного решения системы в случае мейсснеровской конфигурации при любых значениях параметров. Рассчитаны токовые конфигурации для мейсснеровского режима, а также значения критических полей, выше которых мейсснеровская конфигурация не существует. Увеличение структурного фактора b ведет к росту критических полей.

Получены приближенные аналитические решения системы разностных уравнений для случаев малых I и малых значений скачков фазы, хорошо описывающие точное решение на большей части диапазона изменения параметров.

Таким образом, показано, что математический подход, основанный на условиях квантования флюксоида, является эффективным инструментом для решения задач, касающихся процессов, происходящих в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде, что делает его полезным и для анализа проблем гранулированных ВТСП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Zelikman, M.A.** Vortex states and screening currents in a 3D Josephson medium [Text]/ M.A. Zelikman // Superconductor Science & Technology.— 1997.— Vol. 10.— No. 7.— P. 469–474.

2. **Zelikman, M.A.** Vortex states and screening currents in a 3D Josephson medium with small loop inductance [Text] / M.A. Zelikman // Superconductor Science & Technology.— 1997.— Vol. 10.— No. 11.— P. 795–800.

3. **Зеликман, М.А.** Пиннинг вихрей и проникновение магнитного поля в длинный периодически модулированный джозефсоновский контакт [Текст] / М.А. Зеликман // ЖТФ.— 2007.— Т. 77.— № 10.— С. 68–74.

4. **Градштейн, И.С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений [Текст]: Справочник/ И.С. Градштейн, И.М. Рыжик.— М.: Наука, 1971.— 1100 с.

5. **Кулик И.О.** Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах [Текст]: И.О. Кулик, И.К. Янсон.— М.: Наука, 1970. — 272 с.

УДК 621.315.529

С.А. Немов, С.И. Филиппов

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ ОЛОВА В ТЕЛЛУРИДЕ ВИСМУТА ПО ДАННЫМ ЭФФЕКТА ХОЛЛА

В узкозонных слоистых полупроводниках $A_2^{V}B_3^{VI}$ из-за высоких концентраций носителей тока и диэлектрической проницаемости кулоновский потенциал сильно экранирован, и водородоподобные уровни примесей не наблюдаются [1]. Однако в работах [2–8] было обнаружено необычное влияние примеси олова на электрофизические свойства кристаллов дырочного теллурида висмута p-Bi_2Te_3, в частности наблюдались следующие эффекты:

квантовые осцилляции большой амплитуды [2, 7];

значительное улучшение пространственной электрической однородности кристаллов [3];

увеличение плотности электронных состояний ниже вершины валентной зоны в области энергий 15–30 мэВ вблизи уровня Ферми (данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) [4];

необычные температурные зависимости компоненты коэффициента Холла R_{321} [5, 6] и др.

Имеющиеся данные [2 — 8] находят объяснение в предположении существования квазилокальных примесных состояний олова на фоне разрешенного спектра валентной зоны, обусловленных короткодействующим потенциалом примеси.

В работах [2, 7] оценено положение примесной полосы олова при низких температурах (4,2 и 77 К).

В настоящей работе предпринята попытка оценки параметров примесных состояний олова в теллуриде висмута на основе данных по температурной зависимости коэффициента Холла $R_{321}(T)$ в диапазоне температур 77 — 300 К. Использованный нами метод расчета описан в следующем разделе.

Расчет химического потенциала

Для оценок параметров примесных состояний необходимо знать температурную зависимость химического потенциала $\mu(T)$. Однако расчет этого потенциала затруднен из-за сложной структуры валентной зоны теллурида висмута, состоящей из двух подзон, и анизотропии физических свойств. В частности, коэффициент Холла является анизотропной величиной и характеризуется двумя независимыми компонентами R_{213} и R_{321}. Однако согласно многочисленным исследованиям, систематизированным в монографии [1], концентрация дырок p в валентной зоне теллурида висмута может быть достаточно точно определена по бóльшей компоненте тензора Холла R_{321} при температуре 77 К по формуле

$$p = p_{77} = \left(eR_{321}\right)^{-1} \qquad (1)$$

вплоть до холловских концентраций дырок $p_{77} = 1\cdot10^{19}$ см$^{-3}$, когда начинает заметно заполняться дырками дополнительный экстремум при низких температурах.

Однако с ростом температуры начинаются забросы дырок из основного экстремума в дополнительный. Поэтому, чтобы не учитывать вклада тяжелых дырок в эффект Холла, для наших расчетов был выбран образец p-Bi_2Te_3, легированный оловом и иодидом сурьмы (далее Bi_2Te_3:(Sn+SbI_3)), с холловской концентрацией дырок $p_{77} = 3\cdot10^{18}$ см$^{-3}$. Это позволило связать экспериментальную температурную зависимость коэффициента Холла с изменением концентрации дырок в валентной зоне за счет обмена дырками зонных и примесных состояний, т. е.

$$p(T) = \left(eR_{321}\right)^{-1}. \qquad (2)$$

Температурная зависимость химического потенциала $\mu(T)$ была рассчитана методом Ньютона на основе соотношения (2) с использованием формулы для концентрации дырок:

$$p = \frac{4\pi}{h^3}\left(2m_{d1}^{*}k_{\text{B}}T\right)^{3/2}F_{1/2}\left(\mu^{*}\right), \qquad (3)$$

где $\mu^{*} = \mu/k_{\text{B}}T$ — приведенный химический потенциал, отсчитанный от вершины основного экстремума валентной зоны; h — постоянная Планка; k_{B} — постоянная Больцмана; $F_{1/2}(\mu^{*})$ — ин-

теграл Ферми индекса 1/2 [9]; m^*_{d1} – эффективная масса плотности состояний в основном экстремуме валентной зоны, согласно [1] $m^*_{d1} = 0,525 m_e$ (m_e — масса свободного электрона).

Результаты расчета представлены на рисунке.

Расчет энергии примесных состояний олова в теллуриде висмута

Согласно литературным данным [1, 8] олово в теллуриде висмута является примесью замещения висмута, который в данном соединении трехвалентен. Однако валентность (+3) не характерна для олова, и, по-видимому, в теллуриде висмута происходит реакция его диспропорционирования:

$$2Sn^{3+} \Rightarrow Sn^{2+} + Sn^{4+},$$

которая может быть иначе записана в виде

$$2[Sn]^0 \Rightarrow [Sn]^{-1} + [Sn]^{+1},$$

где $[Sn]^0$, $[Sn]^{-1}$, $[Sn]^{+1}$ — соответственно заряд трех-, двух- и четырехзарядового примесных центров олова относительно подрешетки висмута.

Согласно данным статьи [2], в кристаллах Bi_2Te_3:Sn отсутствует сигнал электронного парамагнитного резонанса, что свидетельствует об отсутствии неспаренных электронов на атомах олова, т. е. не наблюдается состояний Sn^{3+} с единственным валентным электроном, не участвующим в образовании химической связи. Это означает, что одноэлектронное состояние ε_3 энергетически невыгодно и лежит значительно выше энергии состояний Sn^{4+} и Sn^{2+}, т. е.

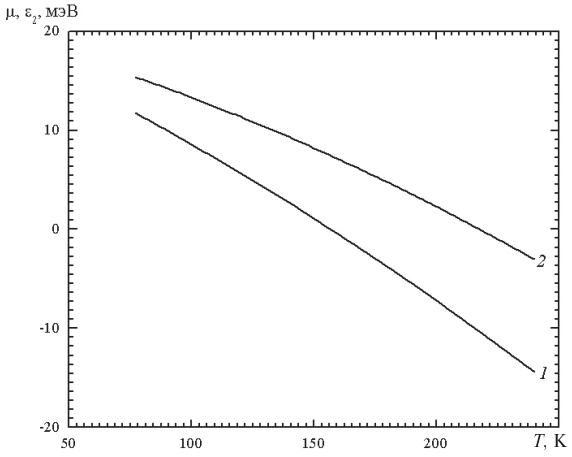
$$|\varepsilon_3 - \varepsilon_2| >> k_B T,$$

где ε_2 — энергия двухэлектронного состояния в расчете на один электрон. В этом случае для среднего числа электронов $\bar{n}$ в примесных состояниях ε_2 справедлива формула

$$\bar{n} = \frac{2}{1 + e^{2(\varepsilon_2 - \mu)/k_B T}}. \qquad (4)$$

Результаты расчетов энергии примесных состояний показаны на рисунке, из которого следует, что двухэлектронный уровень олова с ростом температуры смещается к вершине валентной зоны со скоростью, приблизительно равной $d\varepsilon_2/dT \sim -1 \cdot 10^{-4}$ эВ/К.

Полученные нами результаты позволяют оценить энергию взаимодействия двух электронов



Температурные зависимости химического потенциала (*1*) и энергии двухэлектронного уровня олова (*2*) для образца *p*-Bi_2Te_3 с добавками 0,5 ат. % Sn и 0,2 вес. % SbI_3

U на примесном центре олова (энергию Хаббарда). В образце с половинным заполнением полосы олова разность энергии двухэлектронного уровня Sn и химического потенциала электронов равна по величине половине энергии Хаббарда, т. е. $\varepsilon_2 - \mu = |U|/2$. По нашим оценкам, степень заполнения примесной полосы олова в исследованном образце приблизительно равна 1/2, поэтому мы можем из данных рисунка оценить энергию взаимодействия $|U|$ двух электронов на центре олова. Из рисунка также можно заключить, что энергия Хаббарда в образце в теллурида висмута 10–30 мэВ. Найденные значения согласуются с независимой оценкой величины $|U|$, сделанной нами по максимальному изменению химического потенциала при низких температурах в образцах Bi_2Te_3, легированных оловом и иодидом сурьмы.

Таким образом, в настоящей работе из экспериментальных данных по эффекту Холла в кристаллах Bi_2Te_3:(Sn+SbI_3) сделаны оценки параметров примесных состояний олова ε_2. При низких температурах примесная полоса двухэлектронных состояний олова расположена на фоне разрешенного спектра дырок и имеет значение энергии двухэлектронного состояния $\varepsilon_2 \approx 10 - 20$ мэВ. Сделаны оценки скорости смещения энергии двухэлектронного уровня: $d\varepsilon_2/dT \sim -1 \cdot 10^{-4}$ эВ/К и энергии Хаббарда $|U| \approx 10$–30 мэВ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гольцман, Б.М.** Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 [Текст]: Монография / Б.М. Гольцман, В.А. Кудинов, И.А. Смирнов.— М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. литры, 1972.— 320 с.

2. **Лайхо, Р.** О квазилокальных состояниях Sn в Bi_2Te_3 на основе исследования гальваномагнитных эффектов в классических и квантующих магнитных полях [Текст] / Р. Лайхо, С.А. Немов, А.В. Лашкул, Э. Лахдеранта, Т.Е. Свечникова, Д.С. Дворник // ФТП.— 2007.— Т. 41.— Вып. 5.— С. 565–569.

3. **Житинская, М.К.** Влияние резонансных состояний Sn на электрическую однородность монокристаллов Bi_2Te_3 [Текст] / М.К. Житинская, С.А. Немов, Т. Е. Свечникова [и др.] // ФТП.— 2000.— Т. 34.— Вып. 12.— С. 1417–1419.

4. **Гасенкова, И.В.** Перераспределения электронной плотности в Bi_2Te_3, легированном Sn [Текст] / И.В. Гасенкова, М.К. Житинская, С.А. Немов, Т. Е. Свечникова // ФТТ.— 1999.— Т. 41.— Вып. 11.— С. 1969–1972.

5. **Житинская, М.К.** Особенности легирования Bi_2Te_3 примесью Sn [Текст] / М.К. Житинская, С.А. Немов, Т. Е. Свечникова. // ФТТ.— 1998.— Т. 40.— С. 1428–1432.

6. **Zhitinskaya, M.K.** Peculiarities of electrophysical properties of Bi_2Te_3 doped with Sn [Text] / M.K. Zhitinskaya, S.A. Nemov, T.G. Abaidulina, T.E. Svechnikova // Proc. 16th International Conference on Thermoelectrics (ICT97).— Dresden: Institute of Solid State and Materials Research, 1997.— P. 72–75.

7. **Kulbachinskii, V.A.** Magnetoresistance and Hall effect in Bi_2Te_3:Sn in ultrahigh magnetic fields and under pressure [Text] / V.A. Kulbachinskii, N.B. Brandt, P.A. Cheremnykh [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b).— 1988.— Vol. 150.— P. 237–242.

8. **Horak, J.** Bi_2Te_3 crystals heavily doped with tin atoms [Text] / J. Horak, P. Losiak, J. Geurts [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b).— 1991.— Vol. 167.— P. 459–462.

9. **Стильбанс, Л.С.** Физика полупроводников [Текст] / Л.С. Стильбанс.— М.: Сов. Радио, 1967. 452 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 532.517.4 : 532.529.5

П.Г. Ганин, А.А. Шмидт

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДИАМЕТРА КАПЕЛЬ, ОБРАЗОВАННЫХ ПРИ ДРОБЛЕНИИ НАИБОЛЬШИХ КАПЕЛЬ В АППАРАТЕ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ

В аппаратах с механическим перемешиванием систем типа жидкость — жидкость формируется полидисперсная эмульсия. Диаметр капель значительной части дисперсной фазы существенно меньше теоретически предсказуемого размера — диаметра $d_{кр}$ наибольших капель, устойчивых в аппарате [1, 2].

Для аппарата стандартного конструктивного типа с турбинной мешалкой и разделительными перегородками найдена эмпирическая интегральная функция $F_v(d)$ распределения объема дисперсной фазы от диаметра d капель [3]. На ее основе получены интегральные функции распределения $F_s(d)$ площади поверхности дисперсной фазы и $F_n(d)$ счетного числа капель от диаметра капель [4, 5]. Эти функции позволяют вычислить доли дисперсной фазы, приходящиеся на капли диаметром меньше $d_{п.о}$ среднего поверхностно-объемного диаметра: $F_v(d_{п.о}) \approx 36\,\%$, $F_n(d_{п..о}) \approx 92\,\%$, $F_s(d_{п.о}) \approx 59\,\%$.

Величину $d_{кр}$, рассчитанную теоретически, принято сопоставлять с экспериментальной величиной $d_{п.о}$. Численные значения этих величин удовлетворительно согласуются: $d_{кр} \approx 1,4 d_{п.о}$, что позволяет, с одной стороны, считать теоретическую оценку удовлетворительной, с другой — принимать в расчетах приближение $d_{кр} \approx d_{п.о}$ [2].

Таким образом, в полидисперсной эмульсии доля мелкодисперсной фракции капель диаметром $d < d_{кр}$ весьма значительна. Однако образование капель такого размера не имеет исчерпывающего теоретического объяснения [1, 2]. Можно предположить, что все они образуются путем дробления, но в основном при трех различных условиях [5]:

вблизи твердых поверхностей аппарата;

из наиболее крупных капель $d \approx d_{max}$;

из мелких капель $d \approx d_{кр}$ в ядре турбулентного потока жидкости вследствие многократных испытаний на дробление за время их пребывания в зоне мешалки.

В турбулентном потоке жидкости деформация и последующее дробление капли происходит вследствие превышения разности Δp действующих на каплю динамических напоров, которая вызывает деформацию, над капиллярным давлением p_σ жидкости в капле, которая препятствует деформации [1, 6]. Величины Δp и p_σ различным образом зависят от характерного линейного размера. Приняв за этот размер диаметр капли d, получим: $\Delta p \sim d^{2/3}$ и $p_\sigma \sim d^{-1}$ [1, 6]. Таким образом, с увеличением диаметра капель возрастает динамический напор и понижается капиллярное давление. При деформации капли ее линейный масштаб (наибольший размер) λ превышает диаметр исходной недеформированной капли, т. е. $\lambda > d$, что повышает величину Δp. Поскольку капли представлены полидисперсной эмульсией, логично ожидать, что наиболее крупные из них будут подвергаться большей деформации и могут служить источником наиболее мелких дочерних капель.

Цель работы — теоретическая оценка диаметра наименьших капель образуемых в аппарате при дроблении наиболее крупных капель полидисперсной эмульсии.

Деформация капли при дроблении

Капли не слишком большого размера могут дробиться на две или три дочерние капли, а про-

цесс деформации материнской (исходной) капли с последующим ее дроблением на дочерние капли можно представить в виде пяти последовательно принимаемых форм — симметричных тел вращения (рис. 1). В первом случае: сфера → → вытянутый эллипсоид вращения → капля типа гантели (типа двойной) → двойная капля → → две дочерние капли. Во втором случае: сфера → вытянутый эллипсоид вращения → капля типа тройной → тройная капля → три дочерние капли.

Из соображений симметрии следует, что при дроблении материнской капли на две дочерние, последние должны иметь примерно равные размеры (диаметры) $d_{д1} \approx d_{д2} = d_д$; тогда с учетом сохранения объема $2(1/6)\pi d_д^{\,3} \approx (1/6)\pi d^3$ получим:

$$d_{д1} \approx d_{д2} \approx \left(\frac{1}{2}\right)^{1/3} d \approx 0{,}794 d,$$

а при дроблении на три — будут образованы большая дочерняя капля диаметром $d_{дб}$ и две малые дочерние примерно равного диаметра:

$$d_{дм1} \approx d_{дм2} \approx d_{дм}. \qquad (1)$$

Помимо этого можно предположить, что тройная капля может образовать как три (рис. 1, поз. *8*), так и две (поз. *10*) дочерние капли. Последний случай представляет собой «вырожденный» механизм дробления на три капли, поскольку малая и большая сферы не разрываются, а, сливаясь, образуют одну из дочерних капель.

При дроблении на две капли можно принять, что геометрические размеры капель типа ганте-

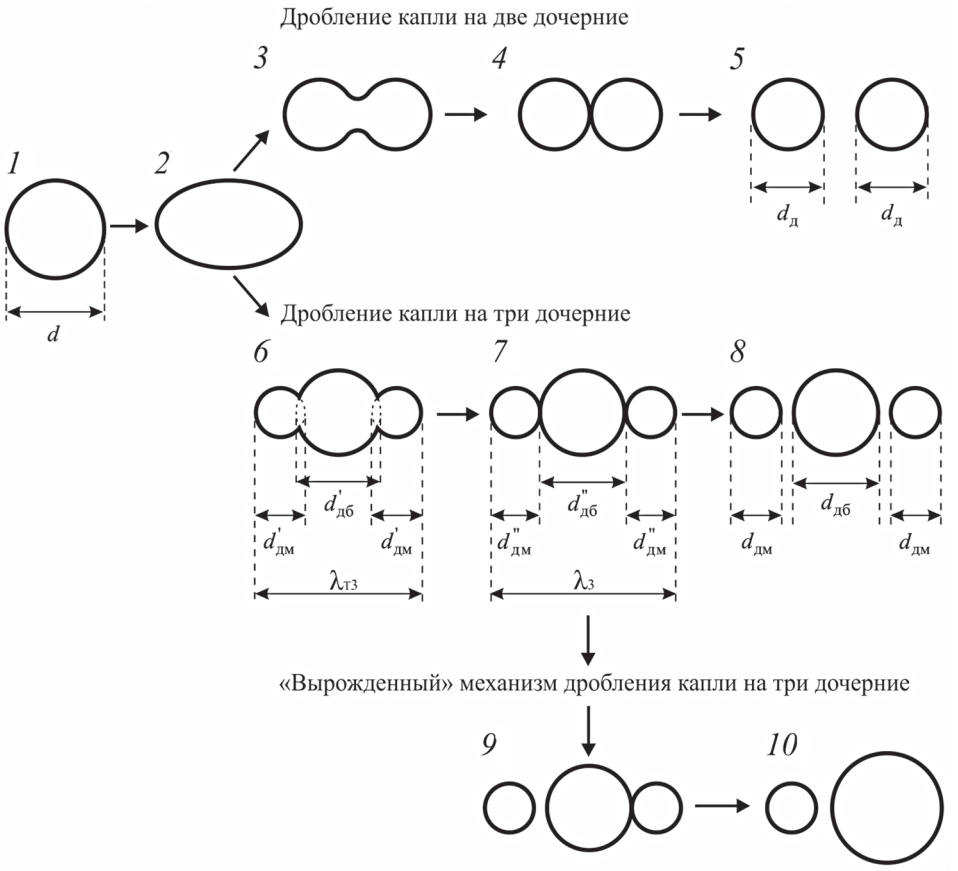


Рис. 1. Этапы деформации и дробления материнской капли на две (*5*, *10*) и три (*8*) дочерние капли. В результате деформации капли приобретают различные формы (*1–3*, *6*); образуют двойные (*4*), тройные (*7*), одиночную и двойную (9) капли

Индексы «дм» и «дб» относятся к диаметрам дочерних малой и большой капель и сфер, соответственно; индексы «3» и «т3» — к линейным масштабам тройной и типа тройной капель; d — диаметр материнской капли

ли (поз. *3*) и двойной капли (поз. *4*) приближенно равны дочерним каплям (поз. *5*).

При дроблении на три капли можно принять, что геометрические размеры капель типа тройной (поз. *6*) и тройной (поз. *7*) приближенно равны соответствующим дочерним каплям (поз. *8*), тогда с учетом симметрии будем иметь:

$$d'_{\text{дм}1} \approx d'_{\text{дм}2} \approx d'_{\text{дм}}; \quad (2)$$

$$d''_{\text{дм}1} \approx d''_{\text{дм}2} \approx d''_{\text{дм}}; \quad (3)$$

$$d'_{\text{дм}} \approx d''_{\text{дм}} \approx d_{\text{дм}}; \quad (4)$$

$$d'_{\text{дб}} \approx d''_{\text{дб}} \approx d_{\text{дб}}; \quad (5)$$

$$\lambda_{\text{т3}} \approx \lambda_3, \quad (6)$$

где $d'_{\text{дм}1}$, $d'_{\text{дм}2}$ и $d'_{\text{дб}}$ — диаметры двух малых и большой вписанных сфер в каплю типа тройной, соответственно; $d''_{\text{дм}1}$, $d''_{\text{дм}2}$ и $d''_{\text{дб}}$ — диаметры двух малых и большой сфер, образующих тройную каплю, соответственно; $\lambda_{\text{т3}}$, λ_3 — линейные масштабы капли типа тройной и тройной капли.

Далее предполагается, что каждый из приведенных этапов деформации капли (см. рис. 1), происходящий в ядре турбулентного потока жидкости, детерминирован разностью динамических напоров, действующих на каплю, и капиллярным давлением жидкости в капле.

Таким образом, в результате дробления материнской капли на две дочерние капли их наименьший диаметр составит $\left(d_{\text{д}}\right)_{\min} \approx 0{,}794 d_{\text{кр}}$ [7], т. е. не могут возникнуть капли, диаметр которых существенно меньше $d_{\text{кр}}$. Можно ожидать, что мелкодисперсная фракция капель будет результатом дробления материнской капли на три (или более) дочерние капли.

Диаметр наибольших капель, устойчивых в аппарате

Диаметр $d_{\text{кр}}$ оценивается из условия $\Delta p = p_\sigma$, которое можно представить в виде [2]:

$$\rho \frac{\left(v'^{,zm}_{d_{\text{кр}}}\right)^2_{\max}}{2} \approx \frac{4\sigma_{\text{жж}}}{d_{\text{кр}}}, \quad (7)$$

где ρ — плотность среды; $\sigma_{\text{жж}}$ — поверхностное натяжение жидкость—жидкость; $\left(v'^{,zm}_{d_{\text{кр}}}\right)_{\max}$ — максимальное значение пульсационной скорости масштаба $\lambda = d_{\text{кр}}$ в зоне мешалки (в этой зоне аппарата локальное значение ε_0^L скорости диссипации энергии в единице объема жидкости является наибольшим $\left(\varepsilon_0^L\right)_{\max} = \varepsilon_0^{zm}$).

Амплитуда пульсационной скорости представляет собой случайную величину, распределенную в первом приближении по нормальному закону [7], что позволяет принять оценку максимального значения пульсационной скорости равной [2]:

$$\left(v'_\lambda\right)_{\max} \approx 3 v'_\lambda, \quad (8)$$

где v'_λ — среднеквадратичное (усредненное за достаточно большой промежуток времени) значение пульсационной скорости масштаба λ.

Для масштаба движения $\lambda_0 < \lambda < l$ (где l — масштаб наибольших пульсаций, λ_0 — внутренний масштаб турбулентности), в соответствии с теорией локальной однородной и изотропной турбулентности и законом «двух третей» Колмогорова — Обухова, локальная величина пульсационной скорости v'^{L}_λ имеет оценку [8, 9]:

$$\left(v'^{L}_\lambda\right)^2 \approx \left(\varepsilon_0^L \lambda\right)^{2/3}. \quad (9)$$

В аппарате с механическим перемешиванием распределение скорости диссипации энергии весьма неоднородно. Рабочий объем жидкости в аппарате принято разделять на зоны, в пределах которых предполагаются условия однородной и изотропной турбулентности [2]. Локальные значения ε_0^z скорости диссипации энергии в зонах аппарата можно выразить через ε_0 — среднее по аппарату значение скорости диссипации энергии:

$$\varepsilon_0^z = k_z \varepsilon_0. \quad (10)$$

Уравнение (7) с учетом оценок (8)–(10) примет вид:

$$\rho \frac{9\left(k_{zm}\varepsilon_0 d_{\text{кр}}\right)^{2/3}}{2} \approx \frac{4\sigma_{\text{жж}}}{d_{\text{кр}}}, \quad (11)$$

где $k_{zm} = \varepsilon_0^{zm} / \varepsilon_0$.

Деформированная капля типа тройной

Условие деформации капли с возникновением формы типа тройной капли (см. рис. 1, поз. *б*) приближенно должно состоять в равенстве капиллярного давления жидкости вблизи наиболее удаленных точек поверхности капли (в этих точках наибольшая положительная кривизна поверхности) и разности динамических напоров линейного масштаба $\lambda_{т3}$ капли типа тройной с учетом (2) будет иметь вид:

$$\rho\frac{\left(v'_{т3}\right)^2}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{d'_{дм}}, \qquad (12)$$

где $v'_{т3}$ — пульсационная скорость масштаба $\lambda=\lambda_{т3}$.

Деформированная капля в форме тройной

Условие образования деформированной капли в указанной форме, ввиду близости ее геометрических размеров и формы с каплей типа тройной, будет состоять в приближенном равенстве капиллярного давления жидкости в образующих ее сферах (дочерних каплях) малого размера и разности динамических напоров линейного масштаба λ_3 тройной капли. Тогда из уравнения (12) с учетом приближений (3), (4) и (6), получим:

$$\rho\frac{\left(v'_3\right)^2}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{d''_{дм}}, \qquad (13)$$

где v'_3 — пульсационная скорость масштаба $\lambda=\lambda_3$.

Уравнение (13) с учетом (9) примет вид:

$$\rho\frac{\left(\varepsilon_0^L\lambda_3\right)^{2/3}}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{d''_{дм}}. \qquad (14)$$

Линейный масштаб тройной капли составит:

$$\lambda_3=2d''_{дм}+d''_{дб}. \qquad (15)$$

Из условия сохранения объема капли при ее деформации следует равенство

$$\frac{1}{6}\pi d^3=\frac{1}{6}\pi\left(d''_{дб}\right)^3+2\cdot\frac{1}{6}\pi\left(d''_{дм}\right)^3,$$

откуда найдем

$$d''_{дб}=\left(d^3-2\left(d''_{дм}\right)^3\right)^{1/3}. \qquad (16)$$

Из уравнения (15) с учетом последнего выражения получим формулу

$$\lambda_3=2d''_{дм}+\left(d^3-2\left(d''_{дм}\right)^3\right)^{1/3}. \qquad (17)$$

Условие (14) с учетом этой формулы примет вид

$$\rho\frac{\left\{\varepsilon_0^L\left[2d''_{дм}+\left(d^3-2\left(d''_{дм}\right)^3\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{d''_{дм}},$$

откуда для зоны аппарата с учетом зависимости (10) будем иметь:

$$\rho\frac{\left\{k_z\varepsilon_0\left[2d''_{дм}+\left(d^3-2\left(d''_{дм}\right)^3\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{d''_{дм}}. \qquad (18)$$

Наименьшей диаметр малой сферы в составе тройной капли

Указанный диаметр $\left(d''_{дм}\right)_{\min}$ малой сферы в конфигурации тройной капли, образуемой при деформации материнской капли произвольного диаметра *d*, оценим из уравнения (13), полагая, что пульсационная скорость масштаба $\lambda=\lambda_3$ достигает максимальной величины $v'_3=\left(v'_3\right)_{\max}$:

$$\rho\frac{\left(v'_3\right)^2_{\max}}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{\left(d''_{дм}\right)_{\min}}. \qquad (19)$$

Уравнение (19) с учетом оценок (8) и (9) примет вид:

$$\rho\frac{9\left(\varepsilon_0\lambda_3\right)^{2/3}}{2}\approx\frac{4\sigma_{жж}}{\left(d''_{дм}\right)_{\min}},$$

откуда с учетом формулы (17) получим приближенное уравнение

$$\rho\frac{9\left\{\varepsilon_0\left[2\left(d''_{дм}\right)_{\min}+\left(d^3-2\left(d''_{дм}\right)^3_{\min}\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx$$

$$\approx\frac{4\sigma_{жж}}{\left(d''_{дм}\right)_{\min}}. \qquad (20)$$

Из полученного уравнения для зоны аппарата с учетом зависимости (10) будем иметь:

$$\rho\frac{9\left\{k_z\varepsilon_0\left[2\left(d''_{\text{дм}}\right)_{\min}+\left(d^3-2\left(d''_{\text{дм}}\right)^3_{\min}\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx$$

$$\approx\frac{4\sigma_{\text{жж}}}{\left(d''_{\text{дм}}\right)_{\min}}. \qquad (21)$$

Диаметр наименьших капель, образующихся при дроблении капли произвольного размера

Представленная модель дробления капель (см. рис. 1) предполагает приближенное равенство (4) диаметров сфер, формирующих каплю типа тройной, тройную каплю и «соответствующих» дочерних капель. Это позволяет использовать уравнения (13) для оценки $d_{\text{дм}}$, а уравнения (19) и (21) — для оценки $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}$. С учетом приближений (4) и (6) из уравнения (13) получим:

$$\rho\frac{\left(v'_3\right)^2}{2}\approx\frac{4\sigma_{\text{жж}}}{d_{\text{дм}}},$$

а из уравнений (19) и (21), соответственно, будем иметь:

$$\rho\frac{\left(v'_3\right)^2_{\max}}{2}\approx\frac{4\sigma_{\text{жж}}}{\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}}, \qquad (22)$$

$$\rho\frac{9\left\{k_z\varepsilon_0\left[2\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}+\left(d^3-2\left(d_{\text{дм}}\right)^3_{\min}\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx$$

$$\approx\frac{4\sigma_{\text{жж}}}{\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}}. \qquad (23)$$

Как следует из этого уравнения, при дроблении материнской капли произвольного диаметра d малая дочерняя капля наименьшего диаметра $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}$ может образоваться в зоне, где величина k_z максимальна (это зона мешалки). Если принять, что $\left(k_z\right)_{\max}=k_{zm}$, то уравнение (23) примет вид:

$$\rho\frac{9\left\{k_{zm}\varepsilon_0\left[2\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}+\left(d^3-2\left(d_{\text{дм}}\right)^3_{\min}\right)^{1/3}\right]\right\}^{2/3}}{2}\approx$$

$$\approx\frac{4\sigma_{\text{жж}}}{\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}}. \qquad (24)$$

Данное уравнение можно преобразовать к приведенному (безразмерному) виду. После деления уравнений (24) и (11) получим:

$$\left\{2\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}+\left[\left(d^*\right)^3-2\left(d^*_{\text{дм}}\right)^3_{\min}\right]^{1/3}\right\}^{2/3}\approx$$

$$\approx\frac{1}{\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}}, \qquad (25)$$

где $d^*_{\text{дм}}=d_{\text{дм}}/d_{\text{кр}}$, $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}=\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}/d_{\text{кр}}$ — приведенные диаметры капли произвольного размера и образуемых при ее дроблении малых дочерних капель наименьшего размера, соответственно.

Уравнения (24) и (25) не имеют аналитического решения. Величины $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min}$ и $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$ можно получить при численном решении уравнений, что возможно при известных значениях величин k_{zm}, ε_0, d и d^*, соответственно.

На рис. 2 приведена расчетная зависимость величин $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$ от d^*, вычисленная по приближенному уравнению (25). Расчетные значения (для $d^*_{\max}=1{,}0-8{,}0$) удовлетворительно аппроксимируются полиномом 2-й степени, что позволяет выразить зависимость $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$ от d^* в явном аналитическом виде:

$$\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}\approx 0{,}0075\left(d^*\right)^2-0{,}1161d^*+$$

$$+0{,}7015, \qquad R_2^2=0{,}9899, \qquad (26)$$

где R_j^2 — величина достоверности аппроксимации полиномом j-й степени.

Можно показать, что при аппроксимации уравнения (25) полиномами 3-й и 4-й степеней значения величин составляют: $R_3^2=0{,}9994$, $R_4^2=0{,}9999$.

Из уравнения (16) с учетом (5) получим:

$$d^*_{\text{дб}}=\left[\left(d^*\right)^3-2\left(d^*_{\text{дм}}\right)^3\right]^{1/3}, \qquad (27)$$

где $d^*_{\text{дб}}=d_{\text{дб}}/d_{\text{кр}}$ — приведенный диаметр большой капли.

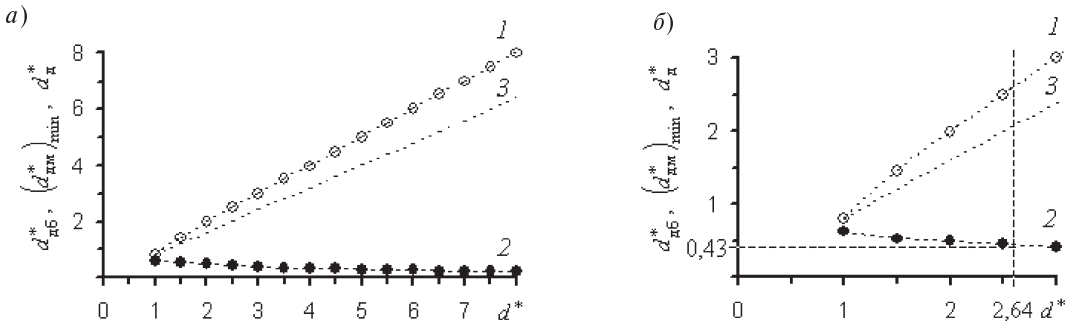


Рис. 2. Расчетные зависимости диаметров дочерних капель от диаметра материнской (приведенные величины): *б* — фрагмент графика *а*.

Дробление на три (*1*, *2*) и на две (*3*) капли; *1*, *2*, *3* — $d^*_{\text{дб}}$, $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$, $d^*_{\text{д}}$, соответственно

Подстановка в уравнения (27) значений $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$, рассчитанных из уравнения (26), даст приближенную зависимость $d^*_{\text{дб}}$ от d^* (см. рис. 2).

Как следует из приближенного уравнения (26) и графика на рис. 2, при увеличении размера (приведенного диаметра d^*) материнских капель расчетный размер (приведенный диаметр $\left(d^*_{\text{дм}}\right)_{\min}$) наименьших дочерних капель существенно уменьшается. Это обусловлено тем, что с увеличением диаметра исходных (материнских) капель уменьшается препятствующее деформации капиллярное давление; вместе с тем увеличивается действующая на них и способствующая деформации разность динамических напоров: капли подвергаются большей деформации и являются источником дочерних капель наименьшего размера.

Диаметр наименьших капель, образующихся в аппарате

Таким образом, источником наименьших дочерних капель в аппарате с перемешиванием могут являться наиболее крупные капли (диаметром $d = d_{\max}$) полидисперсной эмульсии (дробящиеся при достижении пульсационной скорости максимального значения). Приведенный диаметр $d^*_{\max} = d_{\max}/d_{\text{кр}}$ наибольших капель полидисперсной эмульсии (как и входящая в уравнение (24) величина k_{zm}) определяется конструктивными особенностями аппарата и мешалки, наличием в аппарате разделительных перегородок и прочих внутренних устройств, а также коэффициентом заполнения аппарата [2].

Дробление капель в аппарате стандартного конструктивного типа с турбинной мешалкой и разделительными перегородками

Для локальных величин ε_0^L, заданных уравнением (10), в рабочих зонах аппарата указанного конструктивного типа при стандартном коэффициенте заполнения $k = 0{,}5$ известны следующие оценки:

для зоны мешалки $\varepsilon_0^{zm} = (50-100)\varepsilon_0$ [10], а в расчет принимается среднее значение [2]

$$\varepsilon_0^{zm} = k_{zm}\varepsilon_0 \approx 75\varepsilon_0, \qquad (28)$$

для основной зоны аппарата [11]

$$\varepsilon_0^{zf} = k_{zf}\varepsilon_0 \approx 0{,}25\varepsilon_0,$$

где $k_{zm} \approx 0{,}75$ и $k_{zf} \approx 0{,}25$ — числовые коэффициенты для зоны мешалки и основной зоны аппарата, соответственно.

Диаметр наибольших капель, устойчивых в аппарате. Для аппаратов данного конструктивного типа уравнение (11) с учетом оценки (28) примет вид

$$\rho\frac{9\left(75\varepsilon_0 d_{\text{кр}}\right)^{2/3}}{2} \approx \frac{4\sigma_{\text{жж}}}{d_{\text{кр}}}, \qquad (29)$$

откуда следует известная оценка величины $d_{\text{кр}}$ [2]:

$$d_{\text{кр}} \approx 0{,}185\left(\frac{\sigma_{\text{жж}}}{\rho}\right)^{0,6}\varepsilon_0^{-0,4}. \qquad (30)$$

Диаметр малой дочерней капли наименьшего размера, образуемой в аппарате. Оценим указанный диаметр $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)}$. В аппарате данного конструктивного типа диаметр наибольших капель полидисперсной эмульсии составляет $d_{\max} = 2{,}64\,d_{\text{кр}}$ [3]. Из уравнения (26) при соответствующей подстановке $d = d_{\max} = 2{,}64\,d_{\text{кр}}$ найдем

$$\left(d^{*}_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} = \frac{\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)}}{d_{\text{кр}}} \approx 0{,}43$$

(см. рис. 2), откуда получим следующую оценку:

$$\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} \approx 0{,}43\,d_{\text{кр}}, \qquad (31)$$

где величина $d_{\text{кр}}$ определена приближенным уравнением (30).

Уравнение (31) с учетом оценки (30) позволяет найти величину $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)}$ в виде функции $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} \approx f\left(\sigma_{\text{жж}}, \rho, \varepsilon_0\right)$ а с учетом зависимости величины ε_0 от числа n_ω оборотов мешалки в единицу времени [2] — в виде функции $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} \approx f\left(\sigma_{\text{жж}}, \rho, n_\omega\right)$.

Таким образом, предложенная теоретическая модель образования дочерних капель наименьшего диаметра $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)}$ в аппарате позволяет объяснить наличие мелкодисперсной фракции капель диаметром $d < d_{\text{кр}}$. Источником их образования могут являться наиболее крупные капли полидисперсной эмульсии (диаметром $d_{\max}$), дробящиеся в ядре турбулентного потока жидкости в зоне мешалки. Так на основе предложенной модели применительно к аппарату стандартного конструктивного типа с турбинной мешалкой и разделительными перегородками (где $d_{\max} \approx 2{,}64\,d_{\text{кр}}$ [3]) оценка дробления наибольших капель полидисперсной эмульсии $d = d_{\max}$ показывает возможность образования наименьших дочерних капель диаметром $\left(d_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} \approx 0{,}43\,d_{\text{кр}}$, что соответствует приведенному диаметру $\left(d^{*}_{\text{дм}}\right)_{\min(f)} \approx 0{,}43$. Предложенная оценка удовлетворительно (хотя и не в полной мере) согласуется с известными экспериментальными данными. Механизм образования капель диаметром $d^{*} \approx 0{,}4 - 1{,}0$ представляется ожидаемым, тогда как он остается неясным для капель наиболее мелкодисперсной фракции ($d^{*} \approx 0{,}1 - 0{,}4$).

Однако представленная модель не исключает дополнений и уточнений. Дополнение представленной модели предполагает совместный учет, по крайней мере, еще двух факторов: во-первых, многократности испытаний капель на дробление за время их пребывания в зоне мешалки, во-вторых, особенности дробления при наличии в среде поверхностно-активных веществ. Очевидно, что с учетом двух приведенных выше факторов можно объяснить образование капель существенно меньшего размера. Такая оценка будет предметом нашего отдельного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Левич, В.Г.** Физико-химическая гидродинамика [Текст] / В.Г. Левич.— М.: Физматгиз, 1959.— 669 с.

2. **Брагинский, Л.Н.** Перемешивание в жидких средах. Физические основы и методы расчета [Текст] / Л.Н. Брагинский, В.М. Барабаш, В.И. Бегачев.— Л.: Химия, 1984.— 336 с.

3. **Sprow, S.B.** Distribution of drop size produced in turbulent liquid — liquid dispersion [Текст] / S.B. Sprow // Chem. Eng. Sci.— 1967.— Vol. 22.— P. 435–439.

4. **Ганин, П.Г.** Теоретическая оценка устойчивости адсорбционного взаимодействия частиц твердой и жидкой дисперсных фаз в аппарате с перемешиванием [Текст] / П.Г. Ганин // Сорбционные и хроматографические процессы.— 2006.— Т. 6 — № 3.— С. 486–497.

5. **Ганин, П.Г.** Механизм образования мелкодисперсной фракции капель в аппарате с механическим перемешиванием [Текст] / П.Г. Ганин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-матем. науки.— 2009.–№ 4.— С. 7–13.

6. **Колмогоров, А.Н.** О дроблении капель в турбулентном потоке [Текст] / А.Н. Колмогоров // Докл. АН СССР.— 1949.— Т. 66.— № 5.— С. 825–828.

7. **Брэдшоу, П.** Введение в турбулентность и ее измерение [Текст] / П. Бреншоу.— М.: Мир, 1974.— 277 с.

8. **Колмогоров, А.Н.** Рассеяние энергии при локальной изотропной турбулентности [Текст] /

А.Н. Колмогоров // Докл. АН СССР.— 1941.— Т. 32.— № 1.— С. 19–21.

9. **Обухов, А.М.** О распределении энергии в спектре турбулентного потока [Текст] / А.М. Обухов // Докл. АН СССР.— 1941.— Т. 32.— № 1.— С. 22–24.

10. **Mockel, H.O.** Die Verteilung der ortlichen Energiedissipation in einem Ruhrwerk [Текст] / H.O. Mockel // Chem. Techn.— 1989.— Vol. 32.— № 3.— P. 127–129.

11. **Ганин, П.Г.** Вероятность дробления капель в ядре турбулентного потока жидкости за время пребывания в рабочих зонах аппарата с перемешиванием [Текст] / П.Г. Ганин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-матем. науки.— 2008.— № 6.— С. 113–120.

УДК 621.365.23:536.24.001.57

А.А. Плетнев, В.А. Талалов

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ВАННЕ ШЛАКОВОГО РАСПЛАВА МНОГОЭЛЕКТРОДНОЙ РУДНОТЕРМИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОПЕЧИ

Одним из направлений совершенствования электроплавки медно-никелевого сырья является интенсификация процесса [1]. Как показывает теоретический анализ, энерготехнологические показатели работы руднотермической печи (РТП) могут быть улучшены прежде всего путем снижения относительных потерь мощности печи [2]. Поскольку теплопотребление шихты на единицу массы определено ее свойствами и для каждой конкретной технологии неизменно, снижение относительных потерь связано с повышением удельной мощности печи, т. е. увеличением вводимой в печь мощности без изменения ее размеров, либо уменьшением размеров РТП при сохранении вводимой мощности.

Удельная мощность РТП, эксплуатируемых в настоящее время предприятиями горно-металлургической компании «Норильский никель», составляет от 200 до 470 кВт/м^2, и согласно исследованиям имеются резервы для ее увеличения. Так, на опытной печи ООО «Институт Гипроникель» экспериментально подтверждена возможность практической реализации высокоинтенсивной электроплавки на удельной мощности до 1600 кВт/м^2 со снижением удельных затрат электроэнергии в среднем на 15 % [3]. Для промышленного освоения процесса плавки на высокой удельной мощности необходимы дальнейшие, в том числе расчетные, исследования.

В статье изложена математическая модель, разработанная авторами для описания процессов тепломассопереноса, происходящих в ванне шлакового расплава руднотермической электропечи, представлены исходные данные и результаты численного моделирования, выполненного в широком диапазоне изменения удельной мощности печи.

Постановка задачи

Известно, что при работе РТП в бездуговом режиме тепло- и массообмен в ванне шлакового расплава определяет свободная конвекция, вызванная нагревом от неравномерно распределенных внутренних источников тепловыделения, образующихся в результате прохождения электрического тока. Интенсивность конвективного перемешивания расплава в совокупности со способом загрузки шихты непосредственно влияют на технологические показатели работы печи, ее производительность, а также на механические потери цветных металлов с отвальными шлаками.

Химическая агрессивность и высокая (до 1600 °С) температура расплавленного шлака затрудняют изучение характеристик тепломассопереноса на действующих печах. В этих условиях практически единственным способом получения детальной информации о распределении температуры и скорости в шлаковой ванне РТП является численное моделирование, основанное на совместном решении системы уравнений сохранения.

Для вязкой несжимаемой ньютоновской жидкости эта система имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho}\operatorname{grad} p + \operatorname{Div}\left(\frac{2\mu}{\rho}\operatorname{def}\mathbf{V} - \mathbf{VV}\right) + \mathbf{f}; \quad (1)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{V} = 0; \quad (2)$$

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\lambda \operatorname{grad} T - c\rho\mathbf{V}T\right) + Q_v - Q_{melt}; \quad (3)$$

$$\operatorname{div}\left(\sigma \operatorname{grad}\varphi\right) = 0; \quad (4)$$

$$\mathbf{f} = -\mathbf{g}\left[\beta\left(T - T_{ref}\right) + \omega_g\right]; Q_v = \sigma\left(\operatorname{grad}\varphi\right)^2.$$

Здесь $\mathbf{V}$ — вектор скорости; T — температура шлакового расплава; $\mathbf{g}$ — ускорение силы тяжести; ω_g — объемное газосодержание; T_{ref} — фиксированное значение температуры, относительно которого отсчитываются малые изменения плотности; φ — электрический потенциал; Q_v, Q_{melt} — удельные мощности источников Джоулева тепловыделения и источников теплопоглощения, вызванных плавлением замешиваемой в расплав шихты. Остальные обозначения — общепринятые (табл. 1).

Молекулярные коэффициенты переноса в уравнениях (1), (3) непостоянны и могут зависеть от температуры или иных факторов. Заметим, что учет температурной зависимости необходим, прежде всего, для коэффициента вязкости при температурах, близких к температуре плавления-кристаллизации. На основании выполненного нами критериального анализа считаем, что для шлаковой ванны в целом характерен ламинарный режим течения.

Симметричное расположение электродов в горизонтальном сечении шлаковой ванны (рис. 1) позволяет уменьшить размер расчетной области и сократить число ячеек дискретизации без ухудшения пространственного разрешения.

Соответственно на поверхностях, образованных плоскостями симметрии, было использовано граничное условие $\partial\phi/\partial\mathbf{n} = 0$, где $\mathbf{n}$ — нормаль к поверхности, ϕ — общее обозначение для искомых компонентов вектора скорости u, v, w, температуры T или электрического потенциала φ (за исключением потенциала на поверхности симметрии между электродами).

На других граничных поверхностях были приняты следующие условия:

шихта неэлектропроводна;

поверхность раздела шлак-шихта — плоская;

электрический потенциал поверхности симметрии между электродами — нулевой;

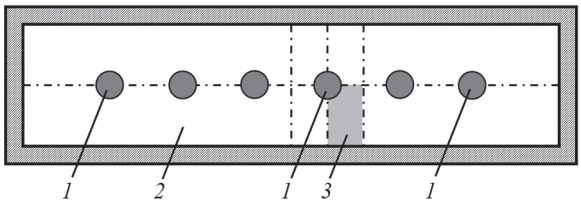


Рис. 1. Вид в плане прямоугольной шестиэлектродной руднотермической электропечи (РТП): *1* — электроды, *2* — шлаковая ванна, *3* — расчетная область

на твердых поверхностях все компоненты вектора скорости равны нулю (условие «прилипания»);

на электроде и на поверхности раздела шлак-штейн вязкое трение отсутствует (условие проскальзывания);

температура поверхности раздела шлак-шихта и температура охлаждаемой боковой стенки равны температурам плавления шихты и шлака, соответственно;

на свободной от шихты поверхности шлаковой ванны вокруг электрода учтен лучистый теплообмен со сводом печи;

на подине задан эффективный коэффициент теплоотдачи $\alpha_{эфф}$;

погруженная в расплав поверхность электрода теплоизолирована.

Последние два условия необходимо пояснить.

На поверхности, ограничивающей снизу расчетную область, имеет место теплоотдача к поду печи, состоящему из огнеупорной кладки, уложенной на бетонный фундамент. Фундамент охлаждается потоком вентилируемого воздуха, что учтено граничным условием 3-го рода. Эффективный коэффициент $\alpha_{эфф}$ теплоотдачи от штейна к воздуху вычислен с использованием экспериментальных данных [4].

Вследствие высокого контактного сопротивления электрод-шлак вблизи погруженной в расплав поверхности электрода возникает локальный температурный максимум. Наличие такого максимума позволило выделить вокруг электрода поверхность, тепловой поток через которую равен нулю. Допустив, что указанная поверхность расположена в примыкающем к электроду шлаковом расплаве, мы приняли ее в качестве граничной и исключили из рассмотрения сложные для моделирования процессы, происходящие в контактном переходе электрод-шлак.

Метод решения и дискретизация

С целью минимизации вычислительных затрат аппроксимация дифференциальных уравнений была выполнена на одноблочной структурированной ортогональной сетке. Такие сетки хуже адаптируются к расчетным областям сложной формы, но более эффективны с вычислительной точки зрения, так как позволяют (при одинаковом сеточном разрешении) резко уменьшить число арифметических операций, необходимых для продвижения решения на один шаг по времени. Это свойство становится особенно ценным в случае, когда отношение характерного времени исследуемого нестационарного процесса к величине максимально допустимого шага по времени имеет порядок 10^6, а число варьируемых параметров и, соответственно, вариантов расчета относительно велико.

Для корректного разрешения пограничных слоев необходимо обеспечить сгущение узлов сетки в областях, где ожидается появление больших градиентов: около боковой водоохлаждаемой стенки, на линии раздела шлак-шихта, вблизи поверхности погруженных в расплав электродов. Поскольку электроды имеют круглое поперечное сечение, последнее требование проще реализовать, если для построения сетки использовать цилиндрическую систему координат. Ввиду того, что на поверхности симметрии между электродами были поставлены «мягкие» граничные условия, искажение формы расчетной области в плоскости *xz* (рис. 2,*а*) слабо повлияло на решение и не отразилось на его интегральных характеристиках, таких как тепловой поток через ограничивающие шлаковую ванну поверхности, средняя по объему температура, средняя скорость перемешивания и т. п. Заметим, что структурированную криволинейную сетку в плоскости *xz*, линии которой совпадают с границами рассматриваемой расчетной области, удается построить только блочно. Вариант многоблочной сетки, использованной при тестировании, показан на рис. 2,*б*.

Аппроксимация уравнений (1) — (3) выполнена методом конечных разностей. Конвективные слагаемые аппроксимированы схемой второго порядка точности с коррекцией потоков [5], обладающей малой численной диссипацией. Неявный дискретный аналог уравнения Пуассона для поправки к давлению решен прямым методом, оптимизированным для разреженных матриц ленточной структуры. Таким образом, переход на следующий временной слой осуществляется без итераций (при отсутствии итераций по нелинейности). Тестирование разработанного программного кода на ряде модельных задач, среди которых свободная конвекция в замкнутой полости, неустойчивость Рэлея — Тейлора, поперечное обтекание кругового цилиндра, показало, что такой код позволяет вести расчет нестационарных конвективных течений на сетках размером до $5 \cdot 10^5$ ячеек без использования многопроцессорных вычислительных систем (кластеров).

Модель верифицирована сравнением результатов тестовых расчетов с данными промышленной эксплуатации РТП [6].

Модель плавления шихты в расплаве

Как показано в работе [6], более половины загружаемой в печь шихты плавится непосредственно в объеме шлакового расплава. В рамках рассматриваемой математической модели замешиваемая в расплав шихта учитывалась в уравнении (3) как объемный сток тепла, расходуемого на ее нагрев и плавление. Полная (интегральная) мощность источника теплопоглощения, связанного с плавлением, считалась заданной, однако

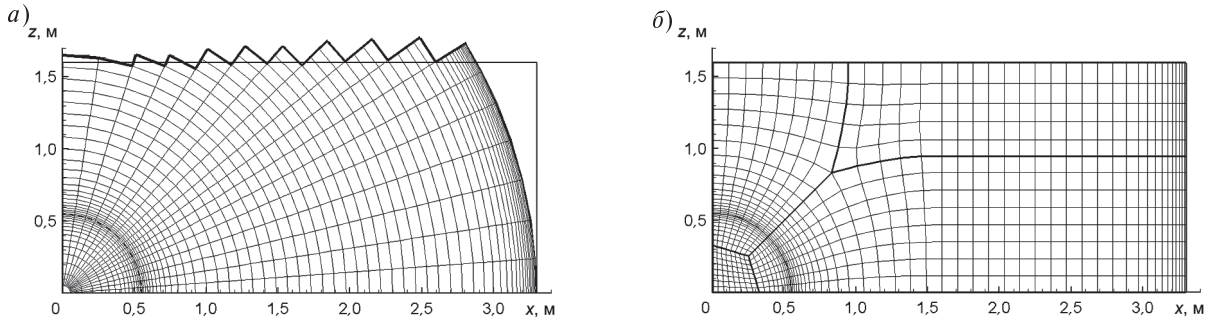


Рис. 2. Расчетная сетка в горизонтальной плоскости *xz* в различных системах координат: *а* — цилиндрической; *б* — обобщенной криволинейной

характер пространственного распределения шихты в расплаве заранее не известен. В основу расчета указанного распределения положена гипотеза о том, что частицы загружаемого печь шихтового материала самопроизвольно или принудительно попадают в расплав вблизи электродов, вовлекаются в конвективное движение шлака и циркулируют в нем до полного расплавления.

Используя ряд обоснованных допущений, а именно что, во-первых, частицы достаточно малы и полностью вовлекаются в движение шлака, во-вторых, что температура расплава в процессе плавления частиц остается постоянной, в-третьих, что частицы достаточно удалены и не влияют друг на друга в процессе плавления, можно показать, что мощность источника теплопоглощения Q_{melt} пропорциональна радиусу частиц, который уменьшается по закону

$$R(\tau) = \sqrt{R_0^2 - 2k\tau}\,, \qquad (5)$$

где R_0 — начальный радиус частицы; τ — время от момента ее попадания в расплав; k — коэффициент, зависящий от теплопроводности и температуры шлака, теплофизических свойств шихты и ее начальной температуры.

Расчет объемного стока тепла состоял из следующей последовательности действий.

1. Через равные интервалы времени, кратные шагу дискретизации, частицы шихты заданного начального размера помещались в определенные точки, расположенные в верхней части шлаковой ванны вблизи электрода.

2. На каждом шаге по времени для каждой частицы рассчитывались следующие параметры:

перемещение в переменных Лагранжа;

текущие значения координат;

время τ, прошедшее от момента попадания частицы в расплав (если $\tau \geq \tau_0$, где τ_0 — время полного плавления для данной фракции, частица исключалась из рассмотрения).

3. Для каждой нерасплавившейся частицы определялись:

сеточная ячейка, в которой находится частица;

положение частицы относительно центра ячейки для сглаживания разрывов, возникающих на границах ячеек;

текущий радиус частицы $R(\tau)$;

мощность источника теплопоглощения, прямо пропорциональная $R(\tau)$.

4. Для каждой сеточной ячейки:

суммировалась мощность теплопоглощения от всех частиц, дающих вклад в данную ячейку;

вычислялась удельная мощность источника Q_{melt} как отношение суммарной мощности к объему ячейки.

Суммирование вклада частиц в объеме элементарной ячейки эквивалентно осреднению по пространству. Такое осреднение делает избыточным расчет эволюции каждой частицы в отдельности, если число частиц в расплаве многократно превышает число ячеек дискретизации. В этом случае целесообразно ввести в рассмотрение так называемые поличастицы, представляющие собой совокупность нескольких частиц шихты одинакового размера, одновременно замешиваемых в расплав и движущихся как единое целое. Использование поличастиц позволило уменьшить темп их замешивания, сохранив заданную интегральную мощность, затрачиваемую на плавление в объеме.

Факторы, ограничивающие рост удельной мощности руднотермических печей

При выборе исходных данных для моделирования следует учитывать ряд факторов электрической, тепловой и физико-химической природы, которые препятствуют повышению удельной мощности руднотермических печей на практике. Как показывает многолетний опыт промышленной эксплуатации РТП, для надежной и стабильной работы печи необходимо:

обеспечивать нормальную эксплуатацию электродов;

защищать футеровку стен печи от разрушения;

поддерживать оптимальную температуру шлакового расплава;

беспрепятственно выпускать из печи продукты плавки.

Суть ограничений состоит в следующем.

Условия эксплуатации электродов ограничивают плотность тока в их поперечном сечении (до 4,5 А/см^2 для самообжигающихся электродов, до 15 А/см^2 для графитированных) и удельную мощность на единицу поверхности контакта электрод-шлак (до примерно 8 МВт/м^2) из-за вероятности возникновения на электродах устойчивого дугового разряда, нарушающего ход плавки.

Надежный способ защиты футеровки стен печи от эрозионного воздействия со стороны расплава и разрушения — это создание застывшего

слоя гарнисажа на обращенной к расплаву поверхности. В этом случае ограничителем тепловой нагрузки на футеровку является максимальная интенсивность теплосъема, которую способна обеспечить система водяного охлаждения. Для стен, футерованных графитовыми блоками, допустимая плотность теплового потока составляет около 100 кВт/м^2.

Условия беспрепятственного выпуска из печи продуктов плавки (помимо поддержания шлакового расплава в оптимальном диапазоне температур, определяемом технологией конкретного металлургического производства) не допускают переохлаждения нижних слоев шлаковой ванны и штейна. В расчетах минимально допустимой температурой штейна мы считали температуру плавления шлака равной 1150 °С.

Исходные данные и варьируемые параметры

В соответствии с целью исследования для оптимизации были выбраны параметры, непосредственно влияющие на удельную мощность и тепловой кпд руднотермической печи. В качестве их исходных значений были приняты характеристики шестиэлектродных печей РТП-3, эксплуатируемых ГМК «Норильский никель».

Подлежали варьированию следующие параметры:

мощность на один электрод, вводимая в печь;

диаметр электродов;

площадь пода печи в расчете на один электрод (ширина шлаковой ванны, умноженная на расстояние между осями электродов);

глубина шлаковой ванны;

относительное заглубление электродов в расплав.

Диапазоны изменения величин, выбранные с учетом практики рудной электротермии, а также указанных ранее ограничений, представлены в табл. 1. Там же приведены физические свойства шлакового расплава, использованные по данным публикаций [7, 8] и зафиксированные для всех вариантов расчета.

В соответствии с технологическими требованиями температура в верхней части шлаковой ванны (так называемом ядре течения) предполагалась неизменной. Для поддержания ее на заданном уровне (1400 °С) рост вводимой в печь мощности компенсировался увеличением массы шихты, замешиваемой в расплав. Это легко осуществимо в рамках математической модели. Регулируемая подача шихты непосредственно в объем шлакового расплава реальной печи возможна способами, указанными в работе [2].

Гранулометрический состав шихты был представлен тремя фракциями, массовая доля и диаметр частиц которых указаны в табл. 2.

Таблица 1

Варьируемые параметры и исходные данные

	Параметр	Обозначение	Размерность	Значения
Параметры РТП	Мощность на один электрод, вводимая в печь	$P_э$	$\frac{\text{МВт}}{\text{электрод}}$	1; 3; 5; 7
	Диаметр электродов	$D_э$	м	1,1; 0,6
	Площадь пода печи в расчете на один электрод	$B_в \times L_в$	м×м	6,6×3,2 3,6×1,8
	Глубина шлаковой ванны	$H_в$	м	1,2; 1,5
	Относительное заглубление электродов в расплав	$H_э/H_в$	–	0,25; 0,35; 0,50
Свойства шлакового расплава	Плотность	ρ	кг/м^3	2700
	Температура плавления	$T_{пл}$	°С	1150
	Удельная теплоемкость	c	Дж/(кг·К)	1000
	Коэффициент теплопроводности	λ	Вт/(м·К)	2,0
	Коэффициент объемного расширения	β	10^{-3} 1/К	1,5
	Действующая электропроводность	σ	(Ом·м)$^{-1}$	20
	Динамическая вязкость (при 1400 °С),	μ	Па·с	1,4

Расчет каждого из вариантов выполнялся до достижения квазистационарного теплового состояния, определяемого совокупностью следующих признаков: стабильная температура нижних слоев шлаковой ванны, установившаяся средняя по объему скорость конвекции, малые колебания теплового баланса (около отметки 100 % с амплитудой менее 2 %).

Таблица 2

Гранулометрический состав шихты

Номер фракции	Диаметр частиц, мм	Массовая доля, %
1	6	35
2	12	45
3	20	20

Результаты расчета

Анализ квазистационарных полей температуры и скорости в объеме шлаковой ванны РТП выявил ряд особенностей, присущих всем выполненным вариантам расчета в диапазоне изменения удельной мощности печи от 100 до 760 кВт/м^2. К таким особенностям относятся характер движения шлака, распределение температуры, плавление замешиваемой в расплав шихты.

Характер движения шлака в руднотермической печи. При нагреве силы плавучести формируют в ванне шлакового расплава замкнутое циркуляционное течение, поддерживаемое энергией восходящего потока, возникающего вблизи погруженной в расплав поверхности электрода. Из-за высокой вязкости расплавленного шлака в печи отсутствуют условия для развития мелкомасштабной турбулентности. Однако обратный градиент температур около поверхности раздела шлак-шихта становится источником гидродинамической неустойчивости Рэлея — Тейлора, и на некотором удалении от электрода течение приобретает нестационарный вихревой характер.

Источники Джоулева тепловыделения в шлаковой ванне распределены крайне неоднородно. Значения удельной мощности Q_v у электродов и вблизи электроизолированных стен печи различаются на 4 — 5 порядков [9]. Из-за относительно слабого нагрева нижних слоев расплава область интенсивного движения (ядро течения), как правило, не распространяется на весь объем шлаковой ванны (рис. 3). Минимальный вертикальный размер ядра течения определяется заглублением электродов. В нижней части шлаковой ванны формируется устойчивая малоподвижная зона стратификации.

Вблизи охлаждаемых стен печи возникает естественно-конвективный пограничный слой, который развивается по направлению сверху вниз и мало зависит от течения в ядре. На границе динамического пограничного слоя происходит его взаимодействие с внешним нестационарным потоком, которое способствует вихреобразованию, но при наличии гарнисажа не оказывает влияния на интенсивность теплоотдачи от расплава к стенам. Причина состоит в том, что при числах Прандтля, свойственных расплавленному шлаку (порядка 10^2), тепловой пограничный слой расположен внутри динамического вязкого подслоя и не воспринимает происходящих далеко за его пределами возмущений скорости.

Поле температуры в шлаковом расплаве. Поля температуры и скорости в шлаковой ванне РТП взаимосвязаны. Интенсивное перемешивание расплава сглаживает даже сильную неоднородность источников тепловыделения и теплопоглощения, в результате ядро течения становится практически изотермичным (рис. 4,*а*). В расположенной ниже ядра зоне стратификации конвекция ослаблена, и характер изменения температуры по высоте близок к линейному (рис. 4,*б*).

Температура донной фазы (штейна) зависит прежде всего от температуры шлака в ядре течения. Если последняя поддерживается неизменной, то на установившуюся температуру штейна оказывают влияние два фактора: высота зоны стратификации, т. е. расстояние от изотермического ядра до границы со штейном, и тепловой поток на подине печи. Иначе говоря, температура донной фазы определена условием теплового баланса на ее границах, так как доля внутреннего тепловыделения в слое штейна крайне мала.

Плавление замешиваемой в расплав шихты. Определяющую роль в пространственном распределении замешиваемой в расплав шихты играет отношение полного времени плавления частиц τ_0 к характерному времени циркуляции расплава в ядре. При $\tau_0 V_{\text{ср.ядра}} / B_{\text{в}} >> 1$ распределение удельной мощности источника Q_{melt} с достаточной для практики точностью можно считать равномерным.

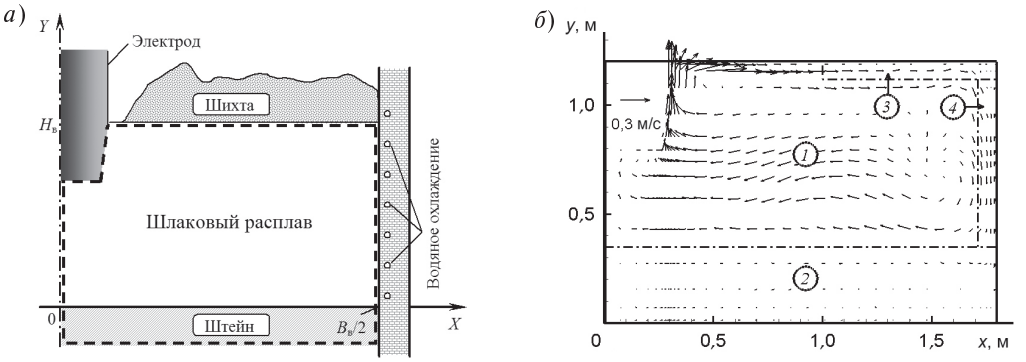


Рис. 3. Сечение расчетной области плоскостью *xy* (*а*) и мгновенное поле скорости в этом сечении (*б*):

1 — ядро течения; *2* — зона стратификации; *3* — зона вихреобразования; *4* — пристенный пограничный слой

Время плавления частиц в расплаве можно выразить из формулы (5):

$$\tau_0 = R_0^2 / 2k .$$

Для предварительно подготовленной, нагретой до 800–900 °С шихты значение коэффициента k имеет порядок величины 10^{-6} м^2/с. Тогда частица диаметром 12 мм растворится в шлаке примерно за 60 с, а на плавление частицы диаметром 20 мм потребуется менее 180 с. Средняя расчетная скорость $V_{\text{ср.ядра}}$ конвекции шлака в ядре течения относительно мала (около 10^{-1} м/с). Основной вихрь, в котором движется замешиваемая шихта, охватывает почти всю расчетную область (см. рис. 4,*а*), т. е. имеет наибольший размер, равный половине ширины печи. Из этого следует, что в РТП отсутствуют условия для многократной циркуляции плавящихся частиц. Распределение мелких и средних фракций по объему оказывается неравномерным: бóльшая часть шихты и связанный с ней источник объемного теплопоглощения сконцентрированы вблизи верхней границы шлаковой ванны. Типичный результат расчета мгновенных распределений параметров в поперечном сечении РТП, проходящем через центр электрода, для случайного момента времени в установившемся тепловом режиме показан на рис. 5 (ширина печи $B_в$ = 6,6 м). Изолиния Q_{melt} = 2 МВт/м^3 (рис. 5,*б*) отстоит от электрода не более чем на 1,5 м и ограничивает ту часть расплава, в которой происходит плавление частиц самой мелкой из рассмотренных фракций (R_0 = 3 мм).

Влияние удельной мощности на тепловой кпд печи. Тепловой кпд печи был вычислен как отношение суммарных тепловых потерь через ограничивающие шлаковую ванну поверхности к вводимой в печь электрической мощности. Исследование показало, что удельный тепловой поток на охлаждаемые стены печи, работающие

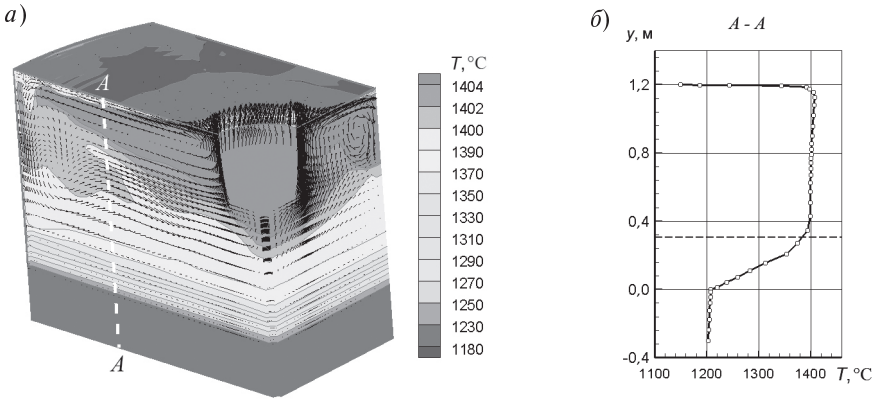


Рис. 4. Распределение температуры и скорости в шлаковой ванне (*а*); профиль температуры в вертикальном сечении (*б*)

в гарнисажном режиме, определяется свойствами и температурой расплава и практически не зависит от параметров течения в ядре. Интенсивность конвекции, количественной характеристикой которой является средняя по объему скорость шлакового расплава, оказывает косвенное влияние на тепловые потери со стен и пода печи. Это влияние состоит в том, что с увеличением мощности и(или) заглубления электродов нижняя граница ядра течения смещается вниз, ближе к штейну, что совпадает с данными натурных измерений и результатами «холодного» физического моделирования [10]. Нами выявлен новый качественный эффект, связанный с изменением высоты ядра, который состоит в следующем.

При повышении удельной мощности РТП возрастает доля тепловыделения в нижней части ванны расплава, где отсутствует объемное теплопоглощение, вызванное плавлением шихты. Данный эффект усиливается с увеличением относительного заглубления электродов в расплав и в совокупности с интенсификацией конвекции приводит к тому, что изотермическое ядро течения постепенно распространяется на весь объем шлаковой ванны. Нормальная работа печи в таких условиях невозможна: отсутствие зоны температурной стратификации шлака вызывает перегрев штейна, повышенный износ пода печи, ухудшает энергетические и технологические показатели плавки. Созданная численная модель позволяет предсказать границы недопустимых режимов работы электропечи и тем самым избежать их на практике.

Было установлено, что увеличение удельной мощности $P_{уд}$ со 180 до 280 кВт/м^2 для печи РТП-3 с площадью пода на один электрод 21,1 м^2 при высоте шлаковой ванны $H_в = 1{,}5$ м снижает долю учтенных в расчете тепловых потерь с 17 до 12 % (при $P_{уд} = 380$ кВт/м^2 относительные тепловые потери составляют 9 %). Сравнительный расчет проектной РТП с графитированными электродами диаметром 60 см и площадью пода на один электрод 6,5 м^2 показал, что при идентичных предыдущему случаю значениях высоты шлаковой ванны и количества замешиваемой в расплав шихты величина $P_{уд}$ составила 440 и 760 кВт/м^2, а относительные тепловые потери — 12 и 7 %, соответственно.

В заключение представим основные итоги выполненной работы.

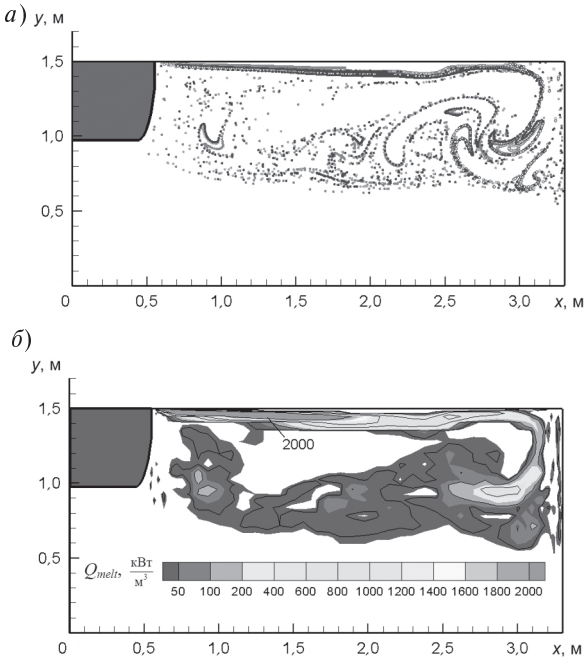


Рис. 5. Мгновенные распределения в поперечном сечении шлаковой ванны РТП: *а* — частиц шихты; *б* — источника объемного теплопоглощения, связанного с их плавлением

Разработана трехмерная математическая модель, предназначенная для расчета нестационарных процессов тепломассообмена в прямоугольной многоэлектродной руднотермической электропечи. Реализующий модель программный код верифицирован и позволяет получать надежную информацию о распределении полей скорости, температуры и объемного тепловыделения в ванне шлакового расплава РТП.

Выполнено исследование высокоинтенсивных режимов работы печи на удельной мощности до 760 кВт/м^2. Согласно результатам моделирования увеличение удельной мощности РТП приводит к снижению доли относительных тепловых потерь в 1,5-2 раза, если температура шлака поддерживается постоянной за счет регулируемой подачи в него шихты.

Моделирование процесса плавления замешиваемой в расплав шихты показало, что распределение мелких и средних фракций по объему является существенно неравномерным: бóльшая часть шихты и связанный с ней источник объемного теплопоглощения сконцентрированы вблизи верхней границы шлаковой ванны.

Выявлен новый качественный эффект, связанный с изменением высоты ядра течения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Русаков, М.Р.** Основные направления совершенствования руднотермической электроплавки медно-никелевого сырья [Текст] / М.Р. Русаков, К.И. Мосиондз, Ю.С. Жуковский // Цветные металлы.— 1998.— № 2.— С. 36–39.

2. **Мосиондз, К.И.** Теоретические основы повышения производительности электропечей рудной плавки [Текст] / К.И. Мосиондз, М.Р. Русаков, Ю.С. Жуковский [и др.] // Совершенствование технологии, аппаратуры и методов исследования в производстве тяжелых цветных металлов: сб. науч. тр.— СПб: Гипроникель, 1992.— С. 9–15.

3. **Русаков, М.Р.** О возможности улучшения энерготехнологических показателей работы электропечей при интенсификации плавки [Текст] / М.Р. Русаков, К.И. Мосиондз, Ю.С. Жуковский / / Цветные металлы.— 1995.— № 12.— С. 9–11.

4. **Лыков, А.Г.** Исследование электрических и тепловых режимов электропечи для выплавки медного штейна [Текст] / А.Г. Лыков, А.Г. Лунин, И.Ф. Овчинников [и др.] // Цветные металлы.— 1993.— №1.— С. 22–26.

5. **Leonard, B.P.** Why you should not use 'hybrid', 'power-law' or related exponential schemes for convective modeling— there are much better alternatives [Text] / B.P. Leonard, J.E. Drummond // International Journal for Numerical Methods in Fluids.— 1995.— Vol. 20.— P. 421–442.

6. **Плетнев, А.А.** Математическое моделирование тепловой работы многошлаковой руднотермической электропечи [Текст] / А.А. Плетнев, В.А. Талалов // Advances of Heat Transfer : сб. докл. конф., Санкт-Петербург, 19— 21 сент. 2007 г.— СПб: Изд-во СПбГТУ, 2007.— Т. 2— С. 449–455.

7. **Купряков, Ю.П.** Шлаки медеплавильного производства и их переработка / Ю.П. Купряков.— М.: Металлургия, 1987.— 200 с.

8. **Ванюков, А.В.** Шлаки и штейны цветной металлургии / А.В. Ванюков, В.Я Зайцев.— М.: Металлургия, 1969.— 408 с.

9. **Плетнев, А.А.** Численное моделирование электрического поля и сопротивления ванны многошлаковой руднотермической печи [Текст] / А.А. Плетнев, В.А. Талалов, М. Р. Русаков // Компьютерное моделирование при оптимизации технологических процессов электротермических производств: сб. науч. тр.— СПб: СПбГТИ(ГУ), 2000.— С. 317–323.

10. **Нус, Г.С.** Теплогенерация и теплообмен в рудно-термических электропечах металлургии тяжелых цветных металлов [Текст] / Г.С. Нус // Электрометаллургия.— 2000.— № 9.— С. 7–14.

УДК 536.423

А.Ю. Снегирёв, С.С. Сажин, В.А. Талалов

МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ТЕПЛООБМЕНА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ДИСПЕРГИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ

Процессы испарения диспергированных жидкостей играют важную роль при смесеобразовании в двигателях внутреннего сгорания, авиационных двигателях, топках котлов, работающих на жидком топливе, в системах пожаротушения и охлаждения, в технологиях сушки суспензий, порошковой металлургии, при аварийных выбросах сжиженных (в том числе горючих) газов, а также в атмосферных явлениях.

Испарение диспергированных жидкостей протекает, как правило, в условиях турбулентной газокапельной струи. Составной частью математической модели газокапельной струи является модель испарения одиночной капли, в которой при минимальных вычислительных затратах необходимо учесть все основные факторы, определяющие динамику испарения. Минимизация вычислительных затрат, особенно важная с учетом того, что в газокапельной струе приходится одновременно рассматривать 10^5–10^6 и более вычислительных «частиц» (групп капель), требует использования упрощенных подходов к описанию процессов переноса внутри капли.

Развитие и современное состояние теории испарения капель подробно изложено в обзоре [1]. Несмотря на многочисленные исследования, направленные на анализ многообразных и сложных физических процессов, сопровождающих испарение капли, практические расчеты часто ограничиваются простейшими версиями моде-

лей, не учитывающими неравномерность поля температуры в капле, циркуляцию жидкости в ней, влияние теплового излучения, эффекты неравновесности и другие факторы. Это в полной мере относится и к современным версиям коммерческого программного обеспечения для гидродинамических расчетов.

В связи с этим возникает необходимость построения и анализа такой модели испарения капли, которая, с одной стороны, учитывала бы все основные физические явления, определяющие динамику испарения, а с другой — оказалась бы достаточно экономичной для использования в качестве компонента вычислительного кода, предназначенного для численного моделирования турбулентных газокапельных струй вихреразрешающими методами [2].

Цель данной работы — сформулировать математическую модель, отвечающую перечисленным требованиям, выделить ключевые безразмерные критерии и построить устойчивый и экономичный численный алгоритм.

Описание модели

Нагрев и испарение капли. Скорость убыли массы капли определяется диффузией пара от поверхности капли в окружающую среду [1]:

$$\frac{dm}{dt} = -\pi d \mathrm{Sh}^* \rho \mathscr{D} \ln\left(1 + B_M\right), \qquad (1)$$

где m, d — масса и диаметр капли, ρ — плотность парогазовой смеси, $\mathscr{D}$ — коэффициент диффузии пара, Sh^* — число Шервуда, модифицированное (как показано ниже) с учетом испарения, B_M — массовое число Сполдинга;

$$B_M = \frac{Y_{vap,s}\left(T_s\right) - Y_{vap,\infty}}{1 - Y_{vap,s}\left(T_s\right)} \qquad (2)$$

(T_s — температура поверхности капли, $Y_{vap,\infty}$ — массовая доля пара в окружающей среде).

Массовая доля пара у поверхности капли равна

$$Y_{vap,s} = \left(P_{vap,s} / P_0\right)\left(M_{vap} / M\right),$$

где $P_{vap,s}$ — парциальное давление пара у поверхности капли, которое вычисляется в предположении межфазного равновесия (давление насыщенного пара); P_0 — давление в окружающей среде;

$M = \left(P_{vap,s} / P_0\right) M_{vap} + \left(1 - P_{vap,s} / P_0\right) M_g$ — молярная масса смеси (M_{vap} и M_g — молярная масса пара и газа).

Значение модифицированного числа Шервуда Sh^* учитывает массопередачу в пограничном слое, формирующемся вокруг капли при обтекании потоком окружающего газа. Если окружающая среда неподвижна, то $\mathrm{Sh}^* = 2$.

Среднеобъемная температура капли $\bar{T}$ определяется из уравнения теплового баланса

$$c_l m \frac{d\bar{T}}{dt} = q_{conv} + q_{vap} + q_{rad}, \qquad (3)$$

где c_l — теплоемкость жидкости, m — масса капли.

В правой части (3) указаны источники тепла, полученного каплей в результате теплообмена с окружающей средой. Конвективный теплообмен моделируется с учетом расходования тепла на нагрев образующегося пара [3, 1]:

$$q_{conv} = -\pi d \mathrm{Nu}^* \frac{\ln\left(1 + B_T\right)}{B_T} \lambda_g \left(T_s - T_g\right), \qquad (4)$$

где λ_g — коэффициент теплопроводности парогазовой смеси, T_g — температура окружающей среды, B_T — тепловое число Сполдинга для нестационарного режима нагрева (или охлаждения) капли;

$$B_T = \left(1 + B_M\right)^{\varphi} - 1. \qquad (5)$$

В равенстве (5) использовано обозначение

$$\varphi = \left(c_{P,vap} / c_{P,g}\right)\left(\mathrm{Sh}^* / \mathrm{Nu}^*\right) / \mathrm{Le},$$

где $\mathrm{Le} = \left(\lambda_g / c_{p,g}\rho\right) / \mathscr{D}$ — число Льюиса; Sh^*, Nu^* — числа Шервуда и Нуссельта, модифицированные с учетом испарения.

Модификация выполнена в соответствии с рекомендациями работы [3]:

$$\mathrm{Sh}^* = 2 + \frac{\mathrm{Sh}_0 - 2}{F_M}, \quad F_M = \left(1 + B_M\right)^{0,7} \frac{\ln\left(1 + B_M\right)}{B_M}; \qquad (6)$$

$$\mathrm{Nu}^* = 2 + \frac{\mathrm{Nu}_0 - 2}{F_T}, \quad F_T = \left(1 + B_T\right)^{0,7} \frac{\ln\left(1 + B_T\right)}{B_T}. \qquad (7)$$

Числа Шервуда и Нуссельта в отсутствие испарения определяются из эмпирических соотношений для сфер (см. например [1]):

$$\mathrm{Sh}_0 = 2 + 0{,}57\,\mathrm{Re}^{1/2}\,\mathrm{Sc}^{1/3},$$

$$\mathrm{Nu}_0 = 2 + 0{,}57\,\mathrm{Re}^{1/2}\,\mathrm{Pr}^{1/3}. \qquad (8)$$

В равенствах (8) число Рейнольдса Re для капли вычисляется через ее диаметр и разность между скоростями капли и потока.

Расход тепла на испарение жидкости описывается равенством

$$q_{vap} = \Delta h_{vap}\dot{m}, \qquad (9)$$

где Δh_{vap} — теплота испарения при температуре поверхности капли.

Теплообмен излучением моделируется в предположении о непрозрачности капли:

$$q_{rad} = -\pi d^2 \varepsilon\sigma\left(T_s^4 - T_{rad}^4\right), \qquad (10)$$

где σ — постоянная Стефана — Больцмана, ε — эффективная степень черноты, T_{rad} — радиационная температура окружающей среды.

Если окружающий газ участвует в теплообмене излучением, то его радиационная температура определяется равенством

$$T_{rad} = \left(G/4\sigma\right)^{1/4},$$

где G — полная интенсивность излучения, приходящего в данную точку пространства со всех направлений (определяется в ходе расчета переноса теплового излучения).

Если окружающий газ прозрачен, то в качестве T_{rad} следует использовать температуру поверхностей на границах расчетной области (например, температуру стен). В данной модели предполагается, что падающий на каплю радиационный тепловой поток поглощается на ее поверхности. Предполагается также, что численное значение эффективной степени черноты ε приближенно учитывает как отражение излучения на поверхности капли, так и пропускание излучения через ее объем. Данный подход является приближенным и не учитывает поглощения излучения в объеме капли, вызванного ее частичной прозрачностью (описание моделей, в которых эти допущения не используются, приведено в обзоре [1]). Несмотря на то, что в настоящей работе вкладом радиационного теплообмена мы пренебрегали, соответствующее слагаемое сохранено, так как оно используется в последующих расчетах с помощью данной модели. В частности, поглощение теплового излучения, испускаемого пламенем, учитывается при моделировании нагрева и испарения капель распыленной огнетушащей жидкости [2].

Для удобства численных расчетов два первых слагаемых в правой части уравнения (3) преобразуются к следующему виду:

$$q_{conv} + q_{vap} = -c_l m\frac{T_s - T_{wb}}{\tau_{conv}}, \qquad (11)$$

где T_{wb} — равновесная температура поверхности капли, которая достигается в случае равенства конвективного теплоподвода и теплопотерь на испарение и нагрев пара в отсутствие теплового излучения (температура мокрого термометра). Величина τ_{conv} представляет характерный масштаб времени релаксации температуры поверхности капли к ее равновесному значению.

В соответствии с выражениями (11) и (4) конвективный масштаб времени τ_{conv} определяется равенством

$$\tau_{conv} = \frac{c_l m\left(T_s - T_{wb}\right)}{\pi d\mathrm{Nu}^*\dfrac{\ln\left(1+B_T\right)}{B_T}\lambda_g\left(T_s - T_g\right) - \Delta h_{vap}\dot{m}}. \qquad (12)$$

Отметим, что в отсутствие испарения $\dot{m} = 0$, $q_{vap} = 0$,

$$q_{conv} = -\pi d\mathrm{Nu}\lambda_g\left(T_s - T_g\right),$$

$$\tau_{conv} = c_l m/\pi d\mathrm{Nu}\lambda_g,$$

и в качестве T_{wb} следует полагать температуру окружающего газа T_g.

Температура мокрого термометра определяется из условия теплового равновесия:

$$q_{conv}\left(T\right) + q_{vap}\left(T\right) = 0, \qquad (13)$$

которое дает трансцендентное уравнение относительно T (температура мокрого термометра T_{wb} является решением этого уравнения).

Радиационное слагаемое также преобразуется к линеаризованному виду:

$$q_{rad} = -c_l m\frac{T_s - T_{rad}}{\tau_{rad}},$$

где

$$\tau_{rad} = \frac{c_l m}{\pi d^2\varepsilon\sigma\left(T_s^2 + T_{rad}^2\right)\left(T_s + T_{rad}\right)}. \qquad (14)$$

С учетом выражений (11) и (14) для среднеобъемной температуры капли будем иметь уравнение

$$\frac{d\bar{T}}{dt} = -\frac{T_s - T_{wb}}{\tau_{conv}} - \frac{T_s - T_{rad}}{\tau_{rad}}, \qquad (15)$$

которое эквивалентно уравнению вида

$$\frac{d\bar{T}}{dt} = -\frac{T_s - T_{eq}}{\tau_{eq}},$$

где

$$T_{eq} = \frac{T_{wb}/\tau_{conv} + T_{rad}/\tau_{rad}}{1/\tau_{conv} + 1/\tau_{rad}}; \frac{1}{\tau_{eq}} = \frac{1}{\tau_{conv}} + \frac{1}{\tau_{rad}}. \qquad (16)$$

Таким образом, рассматриваемая модель испарения капли состоит из уравнения (1) для массы и уравнения (16) для среднеобъемной температуры капли при соответствующих начальных условиях. В уравнении (16) необходимо определить связь между среднеобъемной температурой $\bar{T}$ и температурой поверхности капли T_s.

Поле температуры внутри капли. К настоящему времени используется два подхода к моделированию испарения капель. В первом случае полагают, что поле температуры внутри капли близко к равномерному и потому $\bar{T} = T_s$. Данный подход называют моделью бесконечной теплопроводности, или моделью быстрого перемешивания. Более универсален подход, учитывающий градиент температуры внутри капли. Модели такого типа называют моделями конечной теплопроводности. Наиболее точный метод учета неравномерности поля температуры внутри капли заключается в решении уравнения переноса энергии совместно с уравнением движения (движение жидкости внутри капли развивается благодаря касательным напряжениям на ее поверхности, которые возникают при движении капли относительно окружающего газа). Однако такой подход представляется недопустимо затратным при моделировании очень больших коллективов капель, как это требуется в расчетах турбулентных газокапельных струй. Упрощенный метод учета циркуляции жидкости внутри капли — использование модели эффективной теплопроводности.

Рассмотрим сначала поле температуры внутри капли в отсутствие циркуляции жидкости в капле. Кроме того, будем полагать, что поле температуры симметрично относительно центра капли:

$$c_l \rho_l \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \lambda_l \frac{\partial T}{\partial r}, \qquad (17)$$

где ρ_l, λ_l — плотность и коэффициент теплопроводности жидкости.

Поле температуры в капле удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$-\lambda_l \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0,$$

$$-\lambda_l \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=d/2} = -\frac{q_{conv} + q_{vap} + q_{rad}}{\pi d^2}. \qquad (18)$$

Интегрирование уравнения (17) по объему капли приводит к уравнению баланса тепла (3), где

$$q_{vap} = \left(\Delta h_{vap} - c_l\left(\bar{T} - T\big|_{r=d/2}\right)\right)\dot{m},$$

а среднеобъемная температура $\bar{T}$ определяется равенством

$$\bar{T} = \frac{1}{\pi d^3/6}\int_0^{d/2} T(r) 4\pi r^2 dr.$$

Отметим, что в работах [1, 4] построена и апробирована модель на основе аналитического решения уравнения (17). Преимущество такой модели заключается в ее применимости на начальной стадии нагрева или охлаждения капли. Однако из-за значительного объема необходимых вычислений применение указанной модели представляется обоснованным в расчетах испарения лишь небольшого количества капель. В то же время на практике требуется расчет газокапельных струй с числом вычислительных частиц порядка 10^5–10^6, что может привести к неприемлемо большим вычислительным затратам в случае использования такой модели. В связи с этим в данной работе (вслед за статьями [5–7] и др.) использован приближенный метод решения уравнения (17), в котором предполагается параболический профиль температуры внутри капли:

$$T(r) = c_0 - c_2 r^2. \qquad (19)$$

Равенство (19) предполагает установление квазистационарного поля температуры в капле, которое достигается по истечении времени, превышающего масштаб времени релаксации температуры внутри капли.

Выполнение граничного условия (18) на поверхности капли означает, что $c_2 = -q/\left(\lambda_l \pi d^3\right)$, где $q = q_{conv} + q_{vap} + q_{rad}$.

Подстановка профиля (19) в выражение для среднеобъемной температуры дает выражение

$$\bar{T} = c_0 - c_2\, 3d^2/20.$$

Далее, для температуры поверхности будем иметь:

$$T_s = c_0 - c_2\, d^2/4,$$

а для температуры центра — $T_c = c_0$. Используя эти соотношения, получим:

$$T_s = \bar{T} + \frac{1}{10}\frac{q}{\pi d \lambda_l}, \qquad T_c = \frac{5}{2}\bar{T} - \frac{3}{2}T_s. \qquad (20)$$

Из выражений (11) и (14) следует, что

$$q = -c_l m\frac{T_s - T_{wb}}{\tau_{conv}} - c_l m\frac{T_s - T_{rad}}{\tau_{rad}} = -c_l m\frac{T_s - T_{eq}}{\tau_{eq}}. \qquad (21)$$

Подставляя выражение (21) в первое равенство (20), получим:

$$T_s = \frac{\bar{T} + \beta T_{eq}}{1+\beta} = \bar{T} + \frac{\beta}{1+\beta}\left(T_{eq} - \bar{T}\right), \qquad (22)$$

где β — безразмерный параметр, τ_l — масштаб времени релаксации поля температуры внутри капли;

$$\beta = \frac{1}{15}\frac{\tau_l}{\tau_{eq}}, \qquad (23)$$

$$\tau_l = \frac{(d/2)^2}{\lambda_l / c_l \rho_l}. \qquad (24)$$

Перепад температуры между центром и поверхностью капли $T_c - T_s$ пропорционален перепаду между среднеобъемной и равновесной температурами:

$$\Delta T = \left|T_c - T_s\right| = \frac{5}{2}\frac{\beta}{1+\beta}\left(\bar{T} - T_{eq}\right). \qquad (25)$$

Наконец, подстановка равенства (22) в правую часть уравнения (16) дает уравнение для среднеобъемной температуры капли

$$\frac{d\bar{T}}{dt} = -\frac{\bar{T} - T_{eq}}{\tau_{eq}(1+\beta)}. \qquad (26)$$

Отметим, что при $\beta << 1$ поле температуры в капле равномерно ($T_s \approx T_c \approx \bar{T}$ и $\Delta T \approx 0$), в то время как при $\beta >> 1$ имеем $T_s \approx T_{eq}$,

$$T_c = \left(5\bar{T} - 3T_{eq}\right)/2;\ \Delta T = 5\left(\bar{T} - T_{eq}\right)/2,$$

где ΔT — максимально возможный перепад температуры внутри капли (с течением времени он стремится к нулю, поскольку $\bar{T} \to T_{eq}$).

Таким образом, использование параболического профиля температуры (19), с одной стороны, позволяет приближенно учесть неравномерность температурного поля внутри капли, а с другой — практически не приводит к дополнительным вычислениям. Роль градиента температуры в капле определяется численным значением безразмерного критерия β, характеризующего отношение $\tau_l/15$ — времени релаксации поля температуры внутри капли и τ_{eq} — времени установления равновесной температуры капли в результате внешнего теплообмена. Легко показать, что в отсутствие испарения и теплового излучения

$$\tau_{eq} = \tau_{conv,0} = c_l m/\left(\pi d \mathrm{Nu} \lambda_g\right)$$

и

$$\beta = \mathrm{Bi}/5,$$

где $\mathrm{Bi} = \left(\mathrm{Nu}/2\right)\left(\lambda_g/\lambda_l\right)$ — число Био.

Поэтому в дальнейшем величину β будем называть критерием Био, модифицированным с учетом испарения.

Подчеркнем, что равенство (25) и уравнение (26) справедливы по истечении начального промежутка времени, продолжительность которого пропорциональна τ_l. Уравнение (26) показывает, что при наличии градиента температуры в капле масштабом времени релаксации среднеобъемной температуры капли к ее равновесному значению T_{eq} является величина $\tau_{eq}(1+\beta)$. В соответствии с (25) и (26) различие между T_c, T_s и $\bar{T}$ становится малым за время, пропорциональное $\tau_{eq}(1+\beta)$, и можно приближенно считать, что перепад температуры в капле снижается до весьма малых значений за время, равное $3\tau_{eq}(1+\beta)$. Это означает, что при достаточно малом β величина $\tau_{eq}(1+\beta)$ представляет и масштаб времени выравнивания температуры *внутри* капли. Напомним, что в отсутствие излучения

$$\tau_{eq}(1+\beta)=\tau_{conv}+\tau_l/15,$$

а в общем случае $\tau_{eq}(1+\beta)=\tau_{eq}+\tau_l/15$.

Модель (20)–(26) на основе параболического температурного профиля (19) имеет важные ограничения. Во-первых, при сколь угодно малом t значения температуры в центре и на поверхности различны, даже если при $t=0$ распределение температуры равномерно и $T_c=T_s$. Это связано с тем, что данная модель несправедлива на некотором начальном промежутке времени, пропорциональном $\tau_l/15$. В самом деле, при $t \ll \tau_l$ квазистационарный профиль температуры, который в данном случае аппроксимируется параболой (19), еще не успевает сформироваться. Если длительность указанного временного промежутка намного меньше других масштабов времени, то данное ограничение не представляется существенным. Для случая, когда это не так, в работе [5] предложен метод искусственного сглаживания зависимости $T_s(t)$ при малых значениях t, который позволяет с хорошей точностью воспроизвести зависимость температуры поверхности от времени, полученную точным (численным или аналитическим) решением уравнения теплопроводности (17). С учетом рекомендаций [5] в данной работе вместо равенства (22) использовано следующее выражение:

$$T_s=\overline{T}+\frac{\beta}{1+\beta}\left(T_{eq}-\overline{T}\right)\times$$

$$\times\left[1-\exp\left(-100\sqrt{\beta}\,\frac{t}{\tau_l/15}\right)\right]. \qquad (27)$$

Для температуры центра $T_c(t)$ использован следующий ограничитель:

$$T_c(t)=\begin{cases}\max\left(T_c(t),T_0\right), & T_g>T_0;\\ \min\left(T_c(t),T_0\right), & T_g<T_0,\end{cases} \qquad (28)$$

где температура центра T_c в правой части равенства определяется из второго равенства (20).

Другое ограничение связано с тем, что в данной модели предполагается монотонный профиль температуры, в то время как монотонность может нарушаться, например, если капля быстро перемещается между областями с существенно разной температурой газа. В этом случае применимость рассматриваемой модели должна быть оценена с учетом временных масштабов, характеризующих изменение внешних тепловых потоков. Приведенные рассуждения не учитывают циркуляцию жидкости внутри капли.

Циркуляция жидкости внутри капли. Дальнейшее развитие модели позволяет приближенно учесть наличие циркуляции жидкости внутри капли. При этом используется известное аналитическое решение для поля скорости и температуры при осесимметричном течении жидкости внутри сферы — вихрь Хилла (см. например статьи [3] и [1]). В этих работах показано, что увеличение интенсивности теплопередачи от поверхности капли к внутренним слоям жидкости из-за циркуляции жидкости определяется числом Пекле

$$\mathrm{Pe}=\frac{|\mathbf{u}-\mathbf{u}_g|\,d}{\lambda_l/(c_l\rho_l)}. \qquad (29)$$

В работе [3] предложено вместо коэффициента теплопроводности жидкости λ_l использовать величину

$$\lambda_{eff}=\chi(\mathrm{Pe})\lambda_l, \qquad (30)$$

где множитель $\chi(\mathrm{Pe})$, который определяется как

$$\chi(\mathrm{Pe})=1{,}86+0{,}86\,\mathrm{th}\left[2{,}245\lg\left(\frac{\mathrm{Pe}}{30}\right)\right], \qquad (31)$$

изменяется от 1,00 до 2,72 при изменении числа Пекле от нуля до бесконечности.

Полезно отметить, что равенство (31) почти идентично равенству

$$\chi(\mathrm{Pe})=1{,}86+0{,}86\,\frac{(\mathrm{Pe}/30)^2-1}{(\mathrm{Pe}/30)^2+1}. \qquad (32)$$

Поскольку, в отличие от (31), равенство (32) не требует вычисления трансцендентных функций, оно и используется в данной работе. Введение эффективной теплопроводности означает, что масштаб времени релаксации поля температуры в капле (24) принимает вид:

$$\tau_l=\frac{(d/2)^2}{\chi\lambda_l/c_l\rho_l}. \qquad (33)$$

Движение капли в газовом потоке. Скорость движения капель в газовом потоке определяется прежде всего силами тяжести и трения. Силы Бассе, Саффмена, Магнуса и роль присоединенной массы не учитываются, поскольку плотность жидкости намного превосходит плотность

газа (более полная совокупность сил, действующих на движущуюся каплю, анализируется, например, в работе [9]). Компоненты скорости и координаты каждой движущейся частицы описываются следующими уравнениями:

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{3}{4d}\frac{\rho}{\rho_l} C_D \left|u_i - u_{g,i}\right|\left(u_i - u_{g,i}\right) + g_i\left(1 - \frac{\rho}{\rho_l}\right), \quad (34)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i . \quad (35)$$

Коэффициент сопротивления C_D мы определяли стандартным образом в предположении сферичности капель:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\mathrm{Re}}\left(1 + \frac{1}{6}\mathrm{Re}^{2/3}\right), & \mathrm{Re} < 1000; \\ 0{,}424, & \mathrm{Re} > 1000, \end{cases} \quad (36)$$

где $\mathrm{Re} = \rho_g \left|\mathbf{u} - \mathbf{u}_g\right| d / \mu_g$ — число Рейнольдса для капли, вычисленное через ее диаметр и разность между скоростями частицы и потока, ρ_g, μ_g — плотность и вязкость газа. Введение времени динамической релаксации частиц

$$\tau_{velo} = \frac{4d}{3}\frac{\rho_l}{\rho C_D \left|\mathbf{u} - \mathbf{u}_g\right|} \quad (37)$$

и установившейся скорости осаждения частицы в поле тяжести

$$u_i^{\infty} = u_{g,i} + \tau_{velo} g_i \left(1 - \rho/\rho_l\right)$$

позволяет записать уравнение (34) в следующем виде:

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{u_i - u_i^{\infty}}{\tau_{velo}} . \quad (38)$$

Отметим, что формула для коэффициента сопротивления (36) может быть представлена в виде

$$C_D = C_D^{Stk} f\left(\mathrm{Re}\right),$$

где $C_D^{Stk} = 24/\mathrm{Re}$ — сопротивление по Стоксу, $f\left(\mathrm{Re}\right) = 1 + \mathrm{Re}^{2/3}/6$.

Тогда время релаксации скорости (37) можно записать как

$$\tau_{velo} = \tau_{velo}^{Stk} / f ,$$

где $\tau_{velo}^{Stk} = \rho_l d^2 / \left(18\mu_g\right)$.

Масштабы времени и безразмерные критерии. В рассматриваемой модели нагрева и испарения капель можно определить три характерных масштаба времени: τ_l (33) — время релаксации поля температуры внутри капли; $\left(1+\beta\right)\tau_{eq}$ — время прогрева капли до равновесной температуры, определяемое равенствами (16) и (23) (оно же — время выравнивания температуры внутри капли, если τ_l достаточно мало) и τ_{evap} — время жизни капли до ее полного испарения .

Отметим, что в определении масштаба времени τ_l неявно сделано допущение о постоянстве коэффициента χ, учитывающего увеличение эффективной теплопроводности за счет внутренней циркуляции жидкости в капле. Это означает, что поле скорости в капле считается установившимся, а это, в свою очередь, эквивалентно допущению о малости характерного времени установления поля скорости в капле. Например, для капель *н*-декана диаметром 0,1 мм в работе [3] показано установление поля скорости за время порядка 0,001 с. Время установления поля скорости в капле определяется размером капли и вязкостью жидкости, и может оказаться, что оно сопоставимо со временем релаксации поля температуры; детальное описание данной стадии процесса требует решения не только уравнения переноса тепла, но и уравнений движения внутри капли. Такой подход не представляется оправданным для целей данной работы, поскольку на стадии установления поля скорости испаряется пренебрежимо малая часть массы капли.

Время жизни капли можно оценить как

$$\tau_{evap} = \left(d_0^{-2}\left|d\left(d^2\right)/dt\right|\right)^{-1} .$$

Используя это определение и равенство (1), будем иметь:

$$\tau_{evap} = \frac{\rho_l d_0^2}{4\mathrm{Sh}^{*}\rho\mathscr{D}\ln\left(1 + B_M\right)} . \quad (39)$$

Важно, что в большинстве случаев начальная температура капли не определяет характерную скорость испарения. Поэтому оценки по формуле (39) следует выполнять для температу-

ры мокрого термометра, при которой испаряется большая часть массы капли.

На основе перечисленных масштабов времени можно получить два независимых безразмерных критерия. Один из них — это число β, определяемое равенством (23). Как отмечено выше, физический смысл критерия β в том, что он определяет величину градиента температуры внутри капли. Еще один критерий можно определить как отношение времени прогрева до равновесной температуры $\tau_{eq}(1+\beta)$ к времени жизни капли τ_{evap}. Можно показать, что в отсутствие теплового излучения указанное отношение выражается как

$$\frac{\tau_{conv}(1+\beta)}{\tau_{evap}} = \frac{2}{3} B_T \frac{c_l (T_s - T_{wb})(1+\beta)}{c_{P,vap}(T_s - T_g) + \Delta h_{vap} B_T}, \quad (40)$$

где для B_T имеет место равенство (5). Если отношение $\tau_{conv}(1+\beta)/\tau_{evap}$ мало, то мал и начальный период, в течение которого температура капли изменяется, а значит большую часть времени капля испаряется при равновесной температуре. В последнем случае для неподвижной капли ($\mathrm{Nu} \approx 2$) имеет место классический закон d^2, а для быстро летящей капли ($\mathrm{Nu} \sim \mathrm{Re}^{1/2} \sim d^{1/2}$) — закон $d^{3/2}$ [8].

Уравнение движения капли (34) порождает еще один безразмерный критерий — число Стокса $\mathrm{Stk} = \tau_{velo}^{Stk}/\tau_0$, равное отношению времени динамической релаксации по Стоксу τ_{velo}^{Stk} к масштабу времени τ_0, характеризующему скорость изменения скорости газа. Значение числа Стокса определяет инерционность капель и характер их взаимодействия с турбулентными пульсациями скорости (см. например [10]).

Численный алгоритм

Расчет теплообмена и испарения капли выполняется в следующем порядке.

1. Вычисляются давление и массовая доля пара у поверхности капли (при температуре поверхности).

2. Определяются теплофизические свойства жидкости в капле и парогазовой смеси. Свойства парогазовой смеси определяются для температуры и состава, рассчитанных по так называемому правилу одной третьей:

$$T^{ref} = T_s + (T_g - T_s)/3;$$

$$Y_{vap}^{ref} = Y_{vap,s} + (Y_{vap,g} - Y_{vap,s})/3.$$

3. Определяются числа Re, Sc, Pr и Sc_0, Nu_0 (по формулам (8)).

4. Вычисляется массовое число Сполдинга B_M по формуле (2).

5. Определяются числа Sh^*, Nu^* по формулам (6) и (7). Используются значения B_T в предыдущий момент времени.

6. Вычисляется тепловое число Сполдинга B_T по формуле (5). Шаги 5 и 6 повторяются до сходимости по B_T.

7. Определяется скорость убыли массы $\dot{m}$ по формуле (1) и новое значение массы капли. Масса капли на новом шаге по времени вычисляется по формуле

$$m^{n+1} = m^n + \dot{m}^n \Delta t.$$

Если при испарении капли оказывается, что $m^n < \Delta t |\dot{m}|^n$, то шаг по времени корректируется так, что $\Delta t = m^n / |\dot{m}|^n$; после этого масса капли становится равной нулю и расчет прекращается.

8. Определяется новое значение диаметра капли $d^{n+1} = \left(6m^{n+1}/\pi\rho_l\right)^{1/3}$. Дальнейшие расчеты на данном шаге выполняются для

$$d = (d^n + d^{n+1})/2;$$

$$m = (m^n + m^{n+1})/2.$$

9. Рассчитывается среднеобъемная температура $\bar{T}^{n+1}$ по формулам (41) или (42), а также новые значения температуры центра и поверхности капли (по формулам (22) и (20)).

10. Определяются проекции скорости u_i^{n+1} и координаты x_i^{n+1} капли по формуле (43).

В связи с большим различием численных значений временных масштабов τ_{eq} и τ_{evap}, характерных для процесса прогрева и испарения капель, система дифференциальных уравнений (1) и (26) становится жесткой. Абсолютная устойчивость, монотонность и физически обоснованное асимптотическое поведение численного решения уравнения (26) при больших шагах по времени обеспечивается при использовании не-

явной схемы первого порядка. Если положить, что значения T_{eq}, τ_{eq} и β слабо меняются на одном шаге, то для среднеобъемной температуры в следующий момент времени будем иметь

$$\bar{T}^{n+1} = \frac{\bar{T}^n + T_{eq}\,\Delta t/\left(\tau_{eq}(1+\beta)\right)}{1+\Delta t/\left(\tau_{eq}(1+\beta)\right)}, \qquad (41)$$

где $\bar{T}^n$ — температура на предыдущем шаге.

Альтернативный подход заключается в аналитическом интегрировании уравнения (26) на одном шаге по времени в предположении «замороженных» значений T_{eq}, τ_{eq} и β:

$$\bar{T}^{n+1} = T_{eq} + \left(\bar{T}^n - T_{eq}\right)\exp\left(-\frac{\Delta t}{(1+\beta)\tau_{eq}}\right). \qquad (42)$$

Численные расчеты показали, что при достаточно малом шаге по времени Δt формулы (41) и (42) дают практически неразличимые результаты. Отметим, что применение указанных формул требует предварительного расчета асимптотического значения температуры T_{eq}. Уравнения движения (34), (35) аппроксимируется аналогично:

$$u_i^{n+1} = \frac{u_i^n/\Delta t + u_i^\infty/\tau_{velo}}{1/\Delta t + 1/\tau_{velo}},$$

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t\,\frac{u_i^n + u_i^{n+1}}{2}. \qquad (43)$$

Численный алгоритм реализован в составе модуля Spray программы Fire3D [2].

Для адекватного численного разрешения всех временных масштабов ($(1+\beta)\tau_{eq}$, τ_{velo} и τ_{evap}) шаг по времени должен быть существенно меньше, чем наименьший из них:

$$\Delta t < \min\left((1+\beta)\tau_{eq}, \tau_{velo}, \tau_{evap}\right).$$

Поскольку, как правило,

$$(1+\beta)\tau_{eq} \approx \tau_{velo}$$

и

$$(1+\beta)\tau_{eq} << \tau_{evap},$$

выполнение указанного условия потребует выполнения неоправданно большого числа шагов по истечении времени релаксации температуры и скорости к своим равновесным значениям. Это особенно важно, если модель предназначена для использования в составе гидродинамического решателя, совместно с которым выполняются расчеты очень большого количества капель.

В самом деле, малый шаг по времени

$$\Delta t < \min\left((1+\beta)\tau_{eq}, \tau_{velo}\right)$$

необходим лишь в ходе указанной релаксации, после чего шаг по времени следует адаптировать к времени испарения капли при равновесной температуре. Поэтому в данной работе шаг по времени определяется из условия

$$\frac{1}{\Delta t} = \frac{1}{C}\left\{\frac{\delta}{\min\left(\tau_{eq}(1+\beta), \tau_{velo}\right)} + \frac{1-\delta}{\tau_{evap}}\right\}, \qquad (44)$$

где $C < 1$.

Значения $\tau_{eq}(1+\beta)$, τ_{velo} и τ_{evap} оцениваются в начале расчета. Параметр $\delta = \left|\bar{T} - T_{eq}\right| / \left|T_0 - T_{eq}\right|$ изменяется от 1 до 0 и указывает на степень близости решения (температуры) к асимптотическому пределу. Поскольку $(1+\beta)\tau_{eq} \approx \tau_{velo}$, в случае решения уравнений движения капли полагаем, что этот параметр δ характеризует также и степень релаксации скорости капли. В начале нагрева (или охлаждения) капли $\delta \approx 1$ и $\Delta t \approx C\tau_{eq}(1+\beta)$, а при достижении равновесной температуры имеем $\delta \to 0$ и $\Delta t \approx C\tau_{evap}$. В результате такой адаптации шага по времени к решению оказывается, что при заданном значении C качество численного решения слабо зависит от соотношения $\tau_{eq}(1+\beta)$ и времени жизни капли τ_{evap}.

В качестве примера рассмотрим испарение капли воды с начальным диаметром 0,1 мм и начальной температурой жидкости 20 °C. Параметры окружающего газа будем полагать неизменными. При температуре окружающего воздуха 20 °C имеем

$$\tau_{eq}(1+\beta)/\tau_{evap} = 0{,}0064,$$

а при 1400 °C указанное отношение равно 0,072.

Сравнение рис. 1, *а* и рис. 2, *а*, где приведены результаты расчетов скорости испарения капли при высокой (1400 °C) и низкой (20 °C) температурах окружающего воздуха, показывает качественное различие зависимостей скорости испарения dm/dt от времени. Это связано с тем, что температура мокрого термометра в первом случае оказывается выше, а во втором — ниже на-

чальной температуры капли. В первом случае (рис. 1, *а*) скорость испарения капли меняется немонотонно. На начальном этапе скорость испарения растет, поскольку температура капли увеличивается. Затем, после разогрева капли до температуры мокрого термометра, скорость испарения снижается из-за уменьшения площади поверхности капли. Во втором случае (рис. 2, *а*) скорость испарения монотонно снижается как на начальном этапе охлаждения капли до температуры мокрого термометра, так и при последующем квазистационарном испарении.

Результаты расчетов (рис. 1–3) показывают, что удовлетворительное качество решения можно получить при $C < 0{,}1$, причем решение практически перестает зависеть от шага по времени при $C < 0{,}05$. При температуре окружающего воздуха 20 °C отношение характерных масштабов времени $\tau_{eq}(1+\beta)/\tau_{evap}$ значительно меньше, чем при 1400 °C, что делает задачу более жесткой. Несмотря на это, даже при значительной деградации численного решения (в первую очередь это относится к расчетной скорости испарения), которая наблюдается при $C > 0{,}2$, возможная ошибка расчетного времени жизни капли не превышает 20–30 %. Это объясняется тем, что на начальной стадии испарения (представлена отдельно на рис. 3), когда все параметры изменяются особенно быстро (характерный масштаб времени их изменения равен $\tau_{eq}(1+\beta)$) испаряется лишь малая часть массы капли.

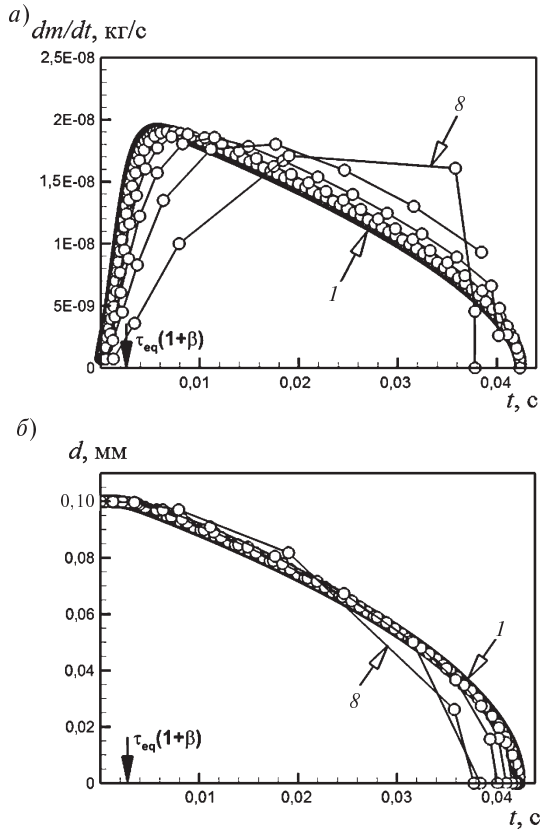


Рис. 1. Результаты численного решения задачи теплообмена и испарения капли (высокая температура окружающей среды): скорость испарения (*а*) и диаметр капли (*б*) в зависимости от шага по времени.

Показаны зависимости, полученные при $C = 0{,}002$ (*1*); 0,005; 0,010; 0,020; 0,05; 0,10; 0,20; 0,50 (*8*). Вода, $d_0 = 0{,}1$ мм, $T_0 = 20$ °C, $T_{air} = 1400$ °C

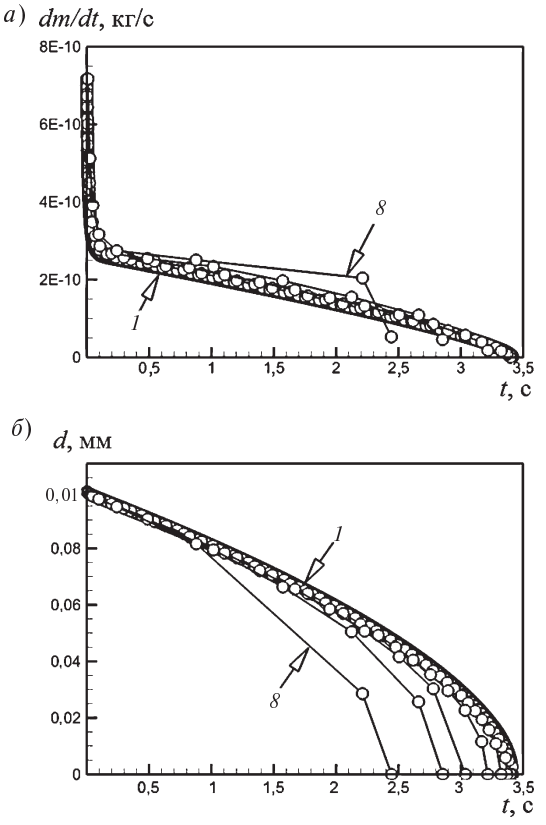


Рис. 2. Результаты численного решения задачи теплообмена и испарения капли (низкая температура окружающей среды): скорость испарения (*а*) и диаметр капли (*б*) в зависимости от шага по времени.

$T_{air} = 20$ °C; значения C, d_0, T_0 даны в подписи к рис. 1

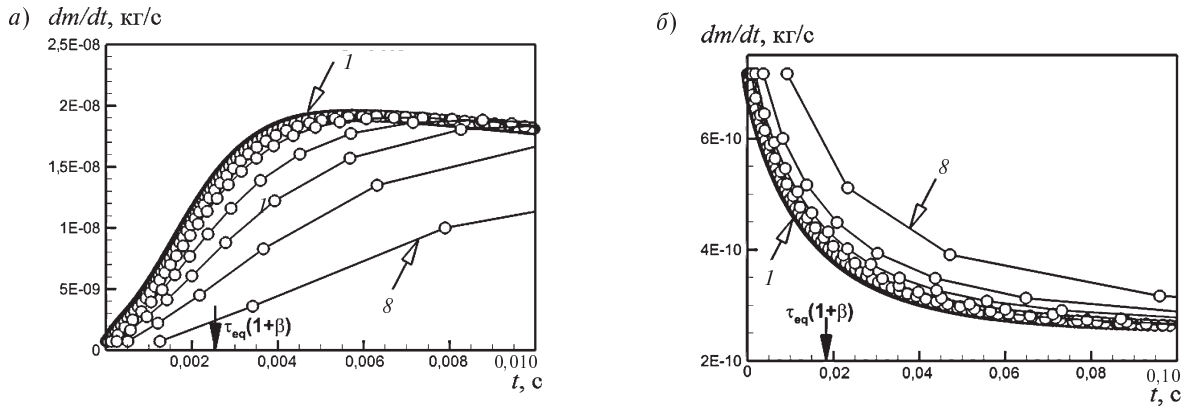


Рис. 3. Зависимости расчетной скорости испарения капли на его начальной стадии от шага по времени при высокой (*а*) и низкой (*б*) температурах окружающей среды (T_{air} = 1400 и 20 °C соответственно);
значения C, d_0, T_0 даны в подписи к рис. 1

Итак, в данной работе сформулирована математическая модель для описания нестационарного и неизотермического испарения капель диспергированной жидкости с учетом неравномерного поля температуры внутри капли и циркуляции в ней жидкости. На основе трех характерных масштабов времени (время релаксации поля температуры в капле, отношение времени релаксации температуры поверхности капли к значению температуры мокрого термометра и время жизни капли до полного испарения) выделены два безразмерных критерия, определяющих величину перепада температуры в капле и его возможное влияние на динамику испарения. Построен абсолютно устойчивый численный алгоритм, позволяющий при достаточно малом числе шагов по времени получать численное решение, слабо зависящее от жесткости системы (она определяется отношением времени прогрева к времени жизни капли). Указанный алгоритм предназначен для использования в составе гидродинамического кода Fire3D [2] при численном моделировании турбулентных газокапельных струй.

Работа выполнена в рамках проекта «Универсальная модель газокапельной струи для инженерных приложений» при поддержке РФФИ (грант 10-08-92602-КО_а), Royal Society (Великобритания, грант JP090548) и ООО «Гефест» (Санкт-Петербург).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sazhin, S.S.** Advanced models of fuel droplet heating and evaporation [Text] / S.S. Sazhin // Progress in Energy and Combustion Science.— 2006.— Vol. 32.— No 2.— P. 162–214.

2. **Snegirev, A.** Flame suppression by water sprays: flame-spray interaction regimes and governing criteria [Text] / A. Snegirev, A. Lipjainen, V. Talalov // Proc. of the 12th International conference Interflam 2010 (Nottingham, UK, 5–7 July 2010). Interscience Comm., London.— 2010.— Vol. 1.— P. 189–199.

3. **Abramzon, B.** Droplet vaporization model for spray combustion calculations [Text] / B. Abramzon, W.A. Sirignano // International Journal of Heat and Mass Transfer.— 1989.— Vol. 32.— No 9.— P. 1605–1618.

4. **Sazhin, S.S.** A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation [Text] / S.S. Sazhin, A. Elwardany, P.A. Krutitskii [et al.] // International Journal of Heat and Mass Transfer.— 2010.— Vol. 53.— No 21–22.— P. 4495–4505.

5. **Dombrovsky, L.A.** A parabolic temperature profile model for heating of droplets [Text] / L.A. Dombrovsky, S.S. Sazhin // ASME Journal of Heat Transfer.— 2003.— Vol. 125.— P. 535–537.

6. **Dombrovsky, L.A.** A simplified non-isothermal model for droplet heating and evaporation [Text] / L.A. Dombrovsky, S.S. Sazhin // International Communications in Heat and Mass Transfer.— 2003.— Vol. 30.— No 6.— P. 787–796.

7. **Watkins, A.P.** Modelling the mean temperatures used for calculating heat and mass transfer in sprays [Text] / A.P. Watkins // International Journal of Heat and Fluid Flow.— 2007.— Vol. 28.— No 3.— P. 388–406.

8. **Терехов, В.И.** Тепломассообмен при испарении капель бинарных растворов [Текст] / В.И. Терехов, Н.Е. Шишкин // Тр. 5-й Рос. нац. конф. по тепломассообмену РНКТ-5.— М.: Изд-во МЭИ, 2010.— Т. 4.— С. 302–305.

9. **Crowe, C.T.** (Ed.) Multiphase flow handbook [Text] / C.T. Crowe // Boca Raton, USA: CRC Press, 2006.— 1156 p.

10. **Sazhin, S.S.** Particle grouping in oscillating flows [Text] / S.S. Sazhin, T. Shakked, V. Sobolev, D. Katoshevski // European Journal of Mechanics B/Fluids.— 2008.— Vol. 27.— No 2.— P. 131–149.

УДК 519.245, 535.34, 535.36

А.М. Кривцун, А.Ю. Сетейкин

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ

Моделирование процесса распространения оптического излучения в биологических средах — актуальная задача биомедицинской оптики. Транспорт фотонов в мутных средах, таких как биологические ткани, достаточно хорошо описывается интегрально-дифференциальным уравнением теории переноса излучения [1]. Однако аналитическое его решение без введения ряда приближений и упрощений не является тривиальным [2]. Поэтому в оптике биотканей широкое распространение получили численные методы моделирования распространения света [3].

Одним из таких методов является метод Монте-Карло, который широко используется для численного моделирования сложных систем во многих областях науки. К основным его преимуществам над другими методами относятся высокая точность, сравнительная простота реализации, а также возможность работы со средами произвольной пространственной конфигурации. Тем не менее, поскольку метод Монте-Карло стохастический и основывается на многократном повторении испытаний для большого числа частиц, то наиболее явный его недостаток состоит в низкой вычислительной эффективности.

Текущие достижения в области разработки систем на базе многоядерных процессоров сделали возможным преодоление основного недостатка метода [4], позволив тем самым превратить его в удобный инструмент биомедицинской диагностики [5]. В частности, представляется целесообразным использование методики массивно параллельных вычислений на графических процессорах (ГП). Поскольку расчеты транспорта фотонов в мутных средах осуществляются независимо (частицы в процессе своего распространения не взаимодействуют друг с другом), данный метод хорошо подходит для реализации с использованием массивно параллельных вычислений на ГП.

Метод Монте-Карло

Этот метод широко применяется для численного решения ряда физических и математических задач, так как предлагает гибкий и в то же время достаточно точный подход к моделированию транспорта фотонов в биологических средах [6]. Суть метода состоит в установлении набора общих правил, описывающих поведение фотонов в тканях и определении математических выражений для функций распределения вероятности двух основных характеристик: длины свободного пробега фотонов между двумя последовательными актами взаимодействия, а также направления, в котором фотоны будут продолжать свое движение после акта рассеяния.

Особенно важный этап реализации метода, определяющий его вычислительную эффективность и точность, — это выбор представления моделируемой среды. Наиболее часто биоткань рассматривают в виде многослойной структуры, при этом оптические параметры в пределах каж-

дого слоя считают постоянными. Несмотря на то, что такая модель среды проста и легко реализуема, в действительности биоткани представляют собой геометрически сложные неоднородные структуры. Таким образом, оптически неоднородную среду удобно аппроксимировать разбиением на оптически однородные элементы простой формы (воксели), для каждого из которых определен свой набор оптических параметров: μ_a — коэффициент поглощения, μ_s — коэффициент рассеяния, g — параметр анизотропии (характеризует угловое распределение рассеяния), n — показатель преломления. К преимуществам такого разбиения следует отнести возможность относительно простого построения точных моделей биологических объектов на основе данных, полученных в результате обработки компьютерных томограмм.

Процесс распространения пакета фотонов в среде состоит в следующем. На этапе инициализации задаются параметры источника излучения: координаты точки входа фотонов в среду и исходное направление их распространения (источник является точечным). Длина свободного пробега фотона до следующего акта взаимодействия выбирается в соответствии с выражением [6, 7]:

$$s = \frac{-\ln \xi}{\mu_t}, \qquad (1)$$

где ξ — случайное число, равномерно распределенное на интервале $(0,1]$; $\mu_t = \mu_a + \mu_s$ — коэффициент экстинкции.

Фотон перемещается на величину s, при этом его статистический вес W, первоначально равный единице, уменьшается пропорционально произведению коэффициента поглощения элемента, в котором происходит взаимодействие, на пройденную длину свободного пробега [7]:

$$W = W_0 \exp(-\mu_a^i l), \qquad (2)$$

где μ_a^i — коэффициент поглощения i-го вокселя; W_0 — статистический вес фотона до взаимодействия со средой.

В процессе распространения фотон может пересечь границу раздела двух вокселей с различным набором оптических параметров. В случае, если параметром, претерпевающим скачок, является показатель преломления, то с помощью закона Френеля рассчитывается вероятность фотона пройти через границу раздела двух сред [8]:

$$R = \frac{1}{2}\left(\frac{\sin^2(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1 + \alpha_2)} + \frac{\mathrm{tg}^2(\alpha_1 - \alpha_2)}{\mathrm{tg}^2(\alpha_1 + \alpha_2)}\right). \qquad (3)$$

В случае преломления траектория дальнейшего распространения фотона рассчитывается с помощью закона Снелиуса:

$$n_1 \sin\alpha_1 = n_2 \sin\alpha_2. \qquad (4)$$

Если изменяется коэффициент рассеяния, то оставшаяся часть длины свободного пробега нормируется на величину μ_s^{i-1}/μ_s^i. Аналогично в случае изменения коэффициента поглощения статистический вес фотона уменьшается в соответствии с коэффициентом поглощения элемента, в котором происходит поглощение. После прохождения фотоном длины свободного пробега следует акт рассеяния: функция распределения вероятности для косинуса угла отклонения ($\cos\theta$) определяется фазовой функцией Хени — Гринштейна [6, 8]:

$$p(\cos\theta) = \frac{1}{4\pi}\frac{1-g^2}{(1+g^2-2g\cos\theta)^{3/2}}. \qquad (5)$$

За актом рассеяния следует расчет нового значения шага фотона и описанный процесс повторяется, пока статистический вес частицы не опустится ниже некоторого порогового значения, по достижении которого дальнейшее отслеживание его распространения теряет смысл, поскольку уже не оказывает существенного влияния на конечный результат. Таким образом, после осуществления описанной последовательности действий для каждого из N фотонов, получаем трехмерный массив $A(nx, ny, nz)$, представляющий собой пространственное распределение поглощенного средой статистического веса фотонов.

Очевидно, что в процессе своего распространения пакеты фотонов не взаимодействуют друг с другом. Это делает возможным одновременное отслеживание траекторий движения множества частиц. Таким образом, задача расчета процесса распространения оптического излучения методом Монте-Карло хорошо подходит для реализации в рамках параллельной архитектуры. Некоторыми авторами были предприняты

попытки такой реализации [4, 5], однако практически в каждой из них предполагается использование дорогостоящего, а следовательно и труднодоступного оборудования. С учетом вышесказанного крайне перспективным представляется применение метода GPGPU (General Purpose Graphics Processing Units — графические процессоры общего назначения), состоящего в использовании графических процессоров (ГП) для неграфических вычислений. Одной из реализаций такого метода является технология CUDA (Compute Unified Device Architecture) [9]. Архитектура позволяет разработчику по своему усмотрению организовывать доступ к набору инструкций ГП и управлять его памятью, таким образом, дает возможность организовывать сложные параллельные вычисления. Скрывая часть сложных технических аспектов программирования ГП, архитектура позволяет значительно упростить, а следовательно и ускорить этап программной реализации математической модели. В рамках методологии программирования CUDA исходный код программы пишется в форме ядер (kernel), которые в большинстве своем схожи с обычными функциями языка программирования СИ. Основное отличие от традиционного исполнения функций центральным процессором (ЦП) состоит в том, что ядра исполняются ГП параллельно. Таким образом, вся задача сначала должна быть разбита на параллельно выполняемые подзадачи, которые затем будут организованы в блоки и передаваться на исполнение потокам ГП.

Для оценки точности реализации представленного алгоритма в качестве одной из тестовых задач была выбрана задача расчета процесса распространения излучения с длиной волны 633 нм, входящей в диапазон так называемого «терапевтического окна», в области с однородным распределением оптических параметров ($\mu_a = 0{,}005$ мм$^{-1}$, $\mu_s = 1{,}0$ мм$^{-1}$ и $g = 0{,}8$), представляющей собой куб со сторонами 40 мм. На рис. 1, *а* представлено схематичное изображение геометрии моделируемой области. Запуск 10^6 пакетов фотонов осуществлялся из точки S с координатами $x = 20$ мм, $y = 20$ мм, $z = 0$ мм, расположенной на поверхности куба, в направлении оси z перпендикулярно к поверхности расчетной области. Расчетные траектории движения для 1000 пакетов фотонов представлены на рис. 1, *б*. В среде с таким набором оптических параметров число отдельных актов рассеяния варьируется в диапазоне от 4 до 215 взаимодействий для каждого из пакетов. На рис. 2, *а* представлено распределение статистического веса фотонов, поглощенных средой (сечение в плоскости xz). Видно, что в этом случае имеет место ярко выраженное рассеяние вперед. На рис. 2, *б* представлено распределение поглощенного статистического веса (сечения в плоскостях xz и xy) в среде с таким же, за исключением параметра анизотропии ($g = 0{,}01$), набором оптических параметров; имеет место

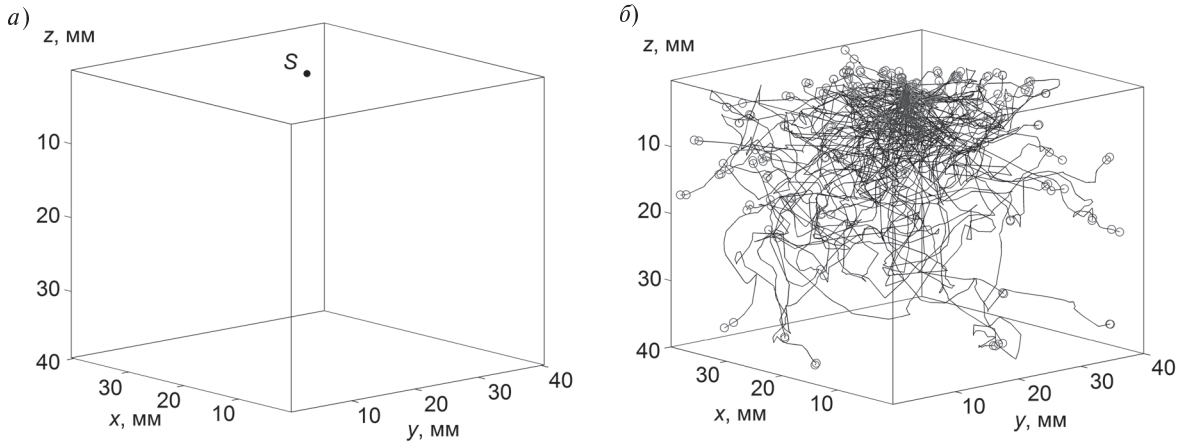


Рис. 1. Схема тестовой расчетной задачи процесса распространения излучения: *а* — модель однородной оптической среды; S — источник (стартовая точка) излучения ($x = y = 20$ мм, $z = 0$); *б* — полученные траектории для 1000 пакетов фотонов;
кружки на гранях куба — точки, в которых фотоны покидают расчетную область

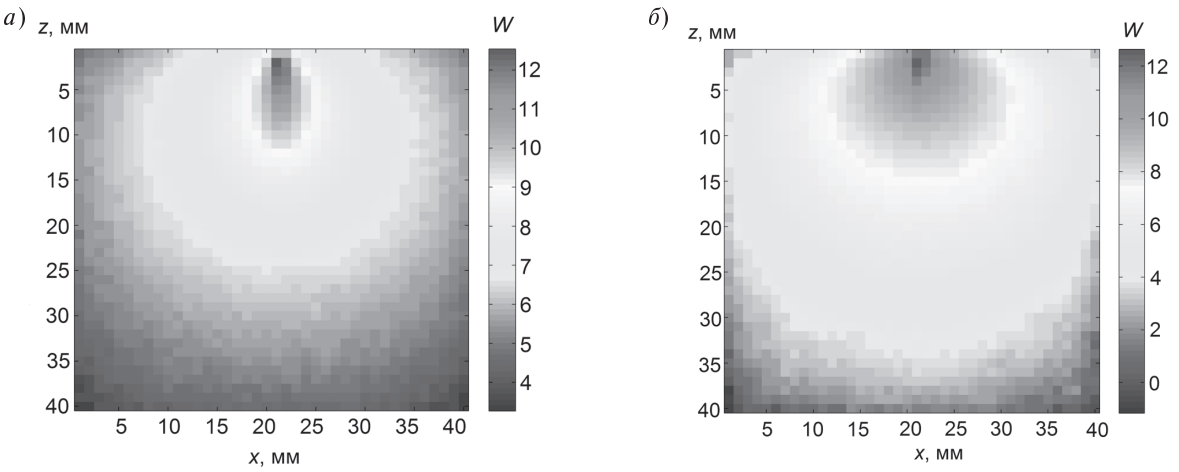


Рис. 2. Распределение статистического веса фотонов, поглощенных средой (сечение в плоскости xz, y = 20 мм) для двух различных значений параметра анизотропии g: 0,80 (*а*) и 0,01 (*б*); $\mu_a = 0{,}05$ мм$^{-1}$, $\mu_s = 1{,}0$ мм$^{-1}$

практически изотропное рассеяние излучения. Результаты расчетов хорошо согласуются с работами других авторов [6 — 8, 10].

В биомедицинской оптике особый интерес представляет задача расчета распространения излучения в многослойных биологических материалах. В качестве такой среды была выбрана шестислойная модель кожи человека (рис. 3); оптические параметры для каждого из моделируемых слоев приведены в таблице [10]. Расчеты проводились с помощью двух реализаций изложенного метода: однопоточной, для ЦП (система с Core i5, частота каждого ядра — 2,27 ГГц), и версии с использованием технологии вычислений на ГП (GeForce GT330, частота ядра — 1,2 ГГц, 48 потоковых процессоров). Версия для ЦП показала производительность, сравнимую с доступными в литературе реализациями [5, 6]; время расчетов составляло 1320 с. В свою очередь версия для ГП продемонстрировала почти 40-кратный, по сравнению с версией для ЦП, прирост вычислительной производительности (время расчетов — 43 с). На рис. 4 представлено распределение поглощенного средой статисти-

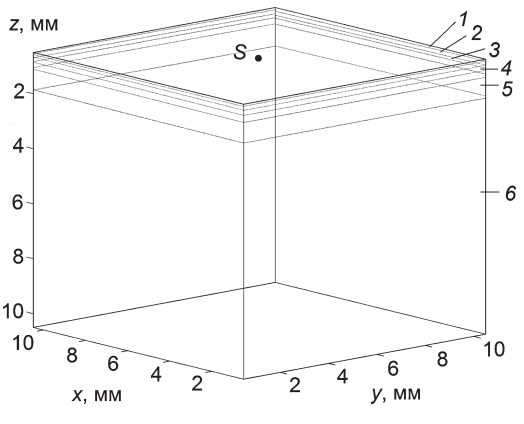


Рис. 3. Схема упрощенной модели кожи человека (6 слоев):
1 — эпидермис; *2* — капиллярная дерма; *3*, *5* — дерма с поверхностным и глубинным сплетением сосудов, соответственно; *4* — ретикулярная дерма; *6* — гиподерма; S — источник излучения ($x = y = 5$ мм, $z = 0$)

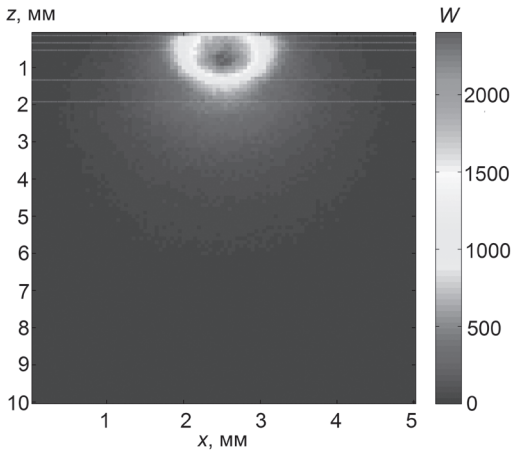


Рис. 4. Распределение статистического веса фотонов, поглощенных многослойной средой (сечение в плоскости xz)

Параметры модели кожи человека (длина волны $\lambda = 633$ нм)

Слой	z, мкм	n	μ_a, мм$^{-1}$	μ_s, мм$^{-1}$	g
Эпидермис	96	1,34	0,088	90	0,85
Папиллярная дерма	192	1,39	0,015	19	0,90
Дерма с поверхностным сплетением сосудов	192	1,40	0,013	35	0,95
Ретикулярная дерма	842	1,39	0,010	19	0,76
Дерма с глубинным сплетением сосудов	576	1,40	0,011	25	0,95
Гиподерма	16500	1,44	0,011	13	0,80

Обозначения: z — толщина слоя; n — относительный показатель преломления; μ_a — коэффициент поглощения; μ_s — коэффициент рассеяния; g — параметр анизотропии.

ческого веса (сечение в плоскости xz). Границы раздела между слоями обозначены пунктиром.

На длине волны источника излучения 633 нм рассеяние превалирует над поглощением; глубина проникновения падающего излучения составляет 2–3 мм. При этом большая часть энергии падающего излучения поглощается приповерхностными слоями: папиллярной дермой, дермой с поверхностным сплетением сосудов и ретикулярной дермой, не проникая на глубину более 1,3 мм. Лишь незначительная часть энергии излучения локализуется гиподермой и дермой с глубинным сплетением сосудов.

Итак, в работе была рассмотрена задача расчета процесса распространения оптического излучения в биологических средах. Моделирование проводилось с использованием метода Монте-Карло, при этом модельная среда аппроксимировалась воксельной кубической сеткой. Такое разбиение является удобным, поскольку позволяет проводить расчеты для сред с произвольной пространственной конфигурацией, а также сравнительно просто получать модели реальных биологических объектов, например с помощью данных, полученных в результате обработки компьютерных томограмм. Для реализации предложенного подхода была выбрана программная архитектура CUDA, что позволило существенно повысить вычислительную эффективность метода и тем самым преодолеть основной его недостаток без необходимости использования дорогостоящих аппаратных ресурсов. Так, применение в качестве расчетного устройства доступного ГП среднего уровня GeForce GT330, позволило достигнуть 40-кратного прироста производительности вычислений. Полученные результаты моделирования для случаев однородной среды хорошо согласуются с работами других авторов в этой области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ishimaru, A.** Wave propagation and scattering in random media [Text] / A. Ishimaru.— New York: Academic Press, 1978.— 600 с.

2. **Hielscher, A.H.** Comparison of finite-difference transport and diffusion calculations for photon migration in homogeneous and heterogeneous tissues [Text] / A.H. Hielscher, R.E. Alcouffe, R.L. Barbour // Physics in Medicine and Biology.— 1998.— Vol. 43.— № 5.— P. 1285–1302.

3. **Welch, A.J.** Optical-thermal response of laser irradiated tissue [Text] / A.J. Welch, M.J.C. Van Gemert;— New York: Plenum Publishing Corporation, 1995.— 952 p.

4. **Page, A.J.** Distributed Monte Carlo simulation of light transportation in tissue [Text] / A.J. Page, S. Coyle, T.M. Keane [et al.] // Proc. 20th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium.–2006.— P. 254–257.

5. **Romero, L.F.** Real-time simulation for laser-tissue interaction model [Text] / L.F. Romero, O. Trelles, M.A. Trelles // Parallel Computing: Current & Future Issues of High-End Computing. Proc. Intern. Conf. ParCo— 2005. NIC Series.— № 33.— P. 415–422.

6. **Wang, L.H.** MCML — Monte Carlo modeling of photon transport in multi-layered tissues [Text] / L.H. Wang, S.L. Jacques, L.Q. Zheng // Computer Methods and Programs in Biomedicine. –1995.— Vol. 47.— P. 131–146.

7. **Boas D.** Three dimensional Monte Carlo code for photon migration through complex heterogeneous media including the adult human head [Text] / D. Boas, J. Culver, J. Stott, A. Dunn // Optics Express.— 2002.— Vol. 10.— P. 159–170.

8. **Jacques, S.L.** Monte Carlo modeling of light transport in tissues [Text] / S.L. Jacques, L.-H. Wang / / Optical-Thermal Response of Laser Irradiated Tissue.— New York: Plenum Publishing Corp. 1995.— P. 73–100.

9. NVIDIA CUDA Programming guide Version 2.3.1 [Электронный ресурс].— 2009. http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/2_3_prod /toolkit/docs/CUDA_C_Program-ming_Guide.pdf

10. **Сетейкин, А.Ю.** Моделирование температурных полей с учетом распространения света в биоткани [Текст] / А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников, Н.И. Фогель // Известия вузов. Приборостроение.— 2007.— Т. 50.— № 9.— С. 24–28.

АТОМНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА КЛАСТЕРОВ, И НАНОСТРУКТУР

УДК 538.915, 539.19, 544.183.2

А.В. Верховцев, Р.Г. Полозков, В.К. Иванов, А.В. Король, А.В. Соловьёв

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

В 1985 году при изучении масс-спектров паров графита, образующихся под воздействием лазерного излучения, впервые был обнаружен углеродный кластер C_{60} [1], что послужило началом исследования семейства фуллеренов — полых замкнутых молекулярных соединений C_n, представляющих собой одну из аллотропных модификаций углерода.

Интересной особенностью фуллеренов является возможность образования связанных систем за счет внедрения внутрь них различных атомов и небольших молекул. Такие соединения называются эндоэдральными фуллеренами, или эндофуллеренами. Первые сообщения об экспериментальном наблюдении эндофуллеренов появились в тот же год, когда произошло открытие фуллеренов [2].

В зависимости от типа внедренного внутрь атома или молекулы выделяют эндофуллерены металлов (эндометаллофуллерены), эндофуллерены неметаллов (в частности, комплексы с внедренными атомами азота или фосфора), эндофуллерены благородных газов, а также так называемые «неклассические» эндофуллерены, внутрь оболочки которых внедрены несколько атомов разного типа.

С момента открытия первых эндофуллеренов эти соединения подверглись всесторонним физическим и химическим исследованиям в связи с возможностью внедрения атома внутрь сферы субнанометрового размера, что представляет огромный фундаментальный и практический интерес. Активно изучались и продолжают изучаться новые возможности для приложений эндофуллеренов в нанотехнологиях [3–6]. Например, локализация атома внутри фуллерена может привести к изоляции внедренного атома от окружающей среды; таким образом, подобный комплекс может играть роль базового элемента для создания квантового компьютера [7, 8]. Химическая изоляция атомов реагентных или ядовитых веществ может открыть новые возможности для рентгенографии и терапии рака [9]. Перспективным направлением в наноэлектронике считается синтез и исследование свойств одностенных нанотрубок с эндофуллеренами внутри — так называемых «наностручков» [10]. На основе соединения $Ar@C_{60}$ впервые были получены эндоэдральные сверхпроводники — $K_3(Ar@C_{60})$ и $Rb_3(Ar@C_{60})$ [11, 12].

В настоящее время активно развиваются теоретические исследования, посвященные, в первую очередь, изучению электронной структуры [13], а также отклика внедренных в фуллерен атомов на ионизирующее электромагнитное излучение [14, 15]. На сегодняшний день существует несоответствие между теоретическими предсказаниями и имеющимися экспериментальными результатами по фотоионизации эндоэдральных атомов. Так называемые «эндоэдральные резонансы» [16] в спектрах фотоионизации внедренных атомов были неоднократно предсказаны теоретически [17–20], но до сих пор не были обнаружены экспериментально [21–25]. Указанные резонансы возникают в результате интерференции волны, испускаемой фотоэлектроном внедренного атома, и волн, образующихся за счет рассеяния на атомах углеродного остова. Таким образом, в спектре фотоионизации эндоэдрального атома должны наблюдаться дополнительные осцилляции по сравнению со случаем изолированного атома. В работе [26] тео-

ретически было показано, что структура возникающих резонансов существенным образом должна зависеть от положения внедренного атома внутри полости фуллерена; при этом были определены критерии образования эндоэдральных резонансов.

На сегодняшний день процесс фотоионизации эндоэдральных атомов рассмотрен теоретически с использованием различных приближений, например, в рамках полуклассической теории [14–16] или теории функционала плотности (ТФП) [17, 18, 20, 27]. Недостатком последнего метода следует считать неполный учет обменного взаимодействия между электронами фуллерена и внедренного атома, а также недостаточный учет корреляций при взаимодействии системы с внешним излучением. Для более точного описания процесса фотоионизации эндоэдральных комплексов представляется необходимым описать электронную структуру эндофуллеренов самосогласованным образом, что реализовано впервые в данной работе.

В качестве объектов исследования выбраны эндофуллерены инертных газов в силу относительной простоты подобных систем по сравнению с эндоэдральными комплексами других типов, а также в связи с их определенными особенностями. В частности, ввиду специфического поведения сечения фотоионизации внешних орбиталей изолированных атомов аргона [28] и ксенона [29], большой интерес представляет изучение соединений $Ar@C_{60}$ и $Xe@C_{60}$.

В данной работе проводится самосогласованный расчет электронной структуры основного состояния эндоэдральных соединений $He@C_{60}$, $Ne@C_{60}$ и $Ar@C_{60}$. Электроны эндоэдрального атома и делокализованные электроны фуллерена описываются в одночастичном самосогласованном приближении Хартри — Фока (ХФ), которое учитывает обменное взаимодействие между всеми электронами системы. Одновременный учет всех электронов системы достигается за счет введения единой электронной конфигурации, позволяющей применить принцип Паули ко всем электронам. В работе используется атомная система единиц: $m = e = \hbar = 1$.

Описание электронной подсистемы

Полная волновая функция Ψ многоэлектронной системы из N частиц, представляется в виде слэтеровского детерминанта, состоящего из одноэлектронных функций $\psi_i(x)$, $i = 1, ..., N$:

$$\Psi(x_1, ..., x_N) \equiv \Psi^{\mathrm{HF}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left\{ \psi_i(x_j) \right\}. \quad (1)$$

Функция $\Psi(x_1, ..., x_N)$, где $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, зависит от N координат всех электронов $\mathbf{r}_i$ и такого же числа проекций их спинов σ_i.

Одноэлектронные функции $\psi_i(x)$ описывают состояние i-го электрона, движущегося в самосогласованном поле остальных электронов системы. Для их определения решается система интегро-дифференциальных уравнений

$$-\frac{\Delta}{2}\psi_i(x) + U_{core}(r)\psi_i(x) +$$

$$+\sum_{j=1}^{N} \int \psi_j^*(x') V_{el}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \times$$

$$\times \left[\psi_j(x')\psi_i(x) - \psi_i(x')\psi_j(x) \right] dx' = \varepsilon_i \psi_i(x), \quad (2)$$

где ε_i — одноэлектронные энергии; V_{el} — потенциал межэлектронного взаимодействия; $U_{core}(r)$ — потенциал взаимодействия всех электронов системы с ядрами атомов. Под интегрированием по dx' подразумевается интегрирование по пространственным переменным $d\mathbf{r}$ и суммирование по спиновым переменным σ.

В случае центрально-симметричного поля одноэлектронные волновые функции $\psi_i(x)$ представляются в виде произведения радиальной, угловой и спиновой частей:

$$\psi_i(x) \equiv \psi_{n_i l_i m_i \sigma_i}(x) = \frac{1}{r} P_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) X_{\sigma_i}. \quad (3)$$

Радиальные функции удовлетворяют граничным условиям

$$P_{n_i l_i}(0) = P_{n_i l_i}(\infty) = 0 \quad (4)$$

и условиям нормировки

$$\left\langle P_{n_i l_i} \middle| P_{n_i l_i} \right\rangle \equiv \int_0^\infty P_{n_i l_i}{}^2(r) dr = 1. \quad (5)$$

Энергия электрона ε_i определяется главным квантовым числом n_i и угловым моментом l_i. Энергию всей электронной подсистемы E_{el} в рамках приближения ХФ можно вычислить, если

использовать одноэлектронные волновые функции из уравнения (2):

$$E_{el}^{\mathrm{HF}} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}\Big(\langle i\,j|V_{el}\left(|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|\right)|i\,j\rangle - $$

$$-\langle i\,j|V_{el}\left(|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|\right)|j\,i\rangle\Big), \qquad (6)$$

где $|i\rangle, |j\rangle$ представляют собой состояния системы, которые описываются, соответственно, волновыми функциями ψ_i, ψ_j.

После разделения переменных в уравнении (2) и отделения угловых частей волновой функции (3) для радиальных функций $P_{n_i l_i}(r) \equiv P_i(r)$, i = 1, ..., s (s — число электронных оболочек в системе), записывается система нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, называемых уравнениями самосогласованного поля [30]:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\left[rU_{core}(r) + Y_i(r)\right] - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + 2E_i\right)\times$$

$$\times P_i(r) = X_i(r) + T, \qquad (7)$$

где слагаемые потенциала, которые описывают прямое и обменное взаимодействия, соответственно, представляются в виде

$$Y_i(r) = \sum_{j=1}^{s}\left(N_j - \delta_{ij}\right)Y_{jj}^0(r) -$$

$$-\frac{1}{N_i}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k>0}\left(1+\delta_{ij}\right)\gamma'_k(ij)Y_{jj}^k(r); \qquad (8)$$

$$X_i(r) = -\frac{2}{rN_i}\sum_{i\neq j}^{s}\sum_k \gamma_k(ij)Y_{ij}^k(r)P_j(r). \qquad (9)$$

Здесь

$$Y_{ij}^k(r) = r\int_0^\infty \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}}P_i(r')P_j(r')dr' =$$

$$= \left[\int_0^r\left(\frac{r'}{r}\right)^k + \int_r^\infty\left(\frac{r}{r'}\right)^{k+1}\right]P_i(r')P_j(r')dr', \qquad (10)$$

где $r_<$, $r_>$ — меньшее и большее из r и r', соответственно.

Величина T, входящая в правую часть уравнения (7), определяется следующим образом:

$$T = -\sum_{i\neq j}^{s}\delta_{l_i l_j}\delta_{\sigma_i\sigma_j}E_{ij}P_i(r), \qquad (11)$$

где E_i, E_{ij} — соответственно, диагональные и недиагональные энергетические параметры; недиагональные параметры E_{ij} обеспечивают ортогональность радиальных функций с одинаковыми орбитальными квантовыми числами l.

Прямые коэффициенты γ'_k и обменные коэффициенты γ_k в выражениях (8),(9) соответствуют взаимодействию электронов внутри заполненной оболочки и взаимодействию между электронами разных заполненных оболочек, соответственно. Их явный вид приведен, например, в монографии [31].

Одночастичные волновые функции и энергии определяются из численного решения системы уравнений (7) методом последовательных приближений. Полученные радиальные функции используются при вычислении полной энергии электронной подсистемы (6).

Электронная структура фуллеренов и эндофуллеренов в рамках сферической модели

Среди семейства фуллеренов выделяют ряд соединений (например C_{60}, C_{240}, C_{540}, C_{960}), относящихся к группе симметрии икосаэдра I_h, т. е. обладающих симметрией, наиболее близкой к сферической. В данной работе рассматриваются эндоэдральные соединения молекулы C_{60} как наиболее простой из сферически-симметричных систем, поскольку количество атомов в ней не слишком велико в отношении трудоемкости самосогласованного расчета. Чтобы не нарушать сферическую симметрию задачи, предполагается, что внедренный атом расположен строго в центре полости фуллерена. В связи с этим в качестве объектов исследования выбраны эндофуллерены благородных газов — их атомы в силу инертности не образуют ковалентных связей с атомами углерода, вследствие чего их можно считать локализованными, в среднем, в центре полости фуллерена. Экспериментальные и теоретические исследования (см. например [12, 15, 26]) подтверждают это предположение.

В фуллерене C_{60} атомы углерода образуют остов в форме усеченного икосаэдра, состоящ-

го из 20 шестиугольников и 12 пятиугольников. При образовании молекулы волновые функции двух 1*s*-электронов каждого атома углерода слабо деформируются и по-прежнему остаются локализованными вблизи ядра каждого атома. При этом считается, что валентные $2s^2 2p^2$-электроны атомов углерода коллективизируются. Поэтому представляется естественным разделить все электроны фуллерена на обобществленные (валентные) и остовные (т. е. 1*s*-электроны) и рассматривать самосогласованное движение только валентных электронов [32]. В таком случае под остовом фуллерена понимается совокупность ядер атомов углерода, частично экранированных атомными 1*s*-электронами, локализованными вблизи них.

Потенциал остова, в котором движутся валентные электроны, можно представить в виде суммы двух частей: (1) потенциала взаимодействия между валентными электронами фуллерена и электронами ионного остова; (2) потенциала взаимодействия валентных электронов фуллерена с ядрами атомов углерода:

$$U_{core}(\mathbf{r}) = \\ = \sum_{\alpha=1}^{N_{at}} \left[-\frac{6}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_\alpha|} + 2\int \frac{|\psi_{1s}(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_\alpha)|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\mathbf{R}_\alpha|} d\mathbf{r} \right]. \quad (14)$$

Здесь N_{at} — число атомов углерода; $\psi_{1s}(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_\alpha)$ — волновая функция 1*s*-электрона в α-м ионе C^{4+}; $\{\mathbf{R}_\alpha\}$ — совокупность координат атомов.

Самосогласованный расчет волновых функций валентных электронов фуллерена с учетом реального положения всех N_{at} ионов углерода, соответствующего точечной группе симметрии молекулы, связан со значительными вычислительными трудностями. Поэтому в данной работе для описания электронной структуры фуллерена используется модель желе для сферического слоя [32]. В рамках данной модели потенциал остова (14) заменяется усредненным по всем положениям $\{\mathbf{R}_\alpha\}$ сферически-симметричным потенциалом, соответствующим равномерно заряженному сферическому слою с наружным радиусом $R_{\max}$, внутренним $R_{\min}$, и имеющим следующий вид [33]:

$$U_{core}(r) = \\ = \begin{cases} -\dfrac{Z}{r}, & r > R_{\max}; \\ -\dfrac{Z}{2\left(R_{\max}^3 - R_{\min}^3\right)}\left[3R_{\max}^2 - r^2\left(1+\dfrac{2R_{\min}^3}{r^3}\right)\right], & R_{\min} < r < R_{\max}; \\ -\dfrac{3Z\left(R_{\max}^2 - R_{\min}^2\right)}{2\left(R_{\max}^3 - R_{\min}^3\right)}, & r < R_{\min}, \end{cases} \quad (15)$$

где Z — число валентных электронов фуллерена.

Для того чтобы порядок следования внешних одноэлектронных уровней в фуллерене совпал с известными квантовохимическими расчетами [34], к потенциалу остова U_{core} в области $R_{\min} < r < R_{\max}$ добавляется дополнительный псевдопотенциал $V_{ps} = -0{,}25$ а.е.

Влияние внедренного внутрь фуллерена атома учитывается добавлением кулоновского потенциала $-Z_{at}/r$, создаваемого ядром эндоэдрального атома. Таким образом, полный положительный потенциал, создаваемый остовом фуллерена и ядром внедренного атома, имеет следующий вид:

$$U_{core}^{eff} = \left(U_{core} + V_{ps}\right) - Z_{at}/r, \quad (16)$$

где Z_{at} — заряд атома, внедренного внутрь фуллерена.

В работе [35] было установлено соответствие между радиальными волновыми функциями фуллерена с определенным количеством узлов и σ- и π-орбиталями планарных графитовых сеток. Соответствие заключается в том, что безузловые волновые функции, сильно локализованные в радиальном направлении на радиусе фуллерена, соответствуют σ-орбиталям, а одноузловые, делокализованные относительно поверхности воображаемой сферы фуллерена, — π-орбиталям. Квантовохимические расчеты фуллерена C_{60} [36] показывают, что в такой молекуле σ-связь образуется путем sp^2-гибридизации $2s2p$ атомных орбиталей углерода с участием трех из четырех валентных электронов. Оставшийся валентный *p*-электрон участвует в образовании π-связи. Таким образом, соотношение σ- и π-орбиталей в фуллерене C_{60} равно трем к одному, следовательно соотношение электронов, расположенных на безузловых и одноузловых орбиталях, берется в аналогичной пропорции.

Электронная конфигурация фуллерена C_{60} имеет вид [37]:

$1s^2 2p^6 3d^{10} 4f^{14} 5g^{18} 6h^{22} 7i^{26} 8k^{30} 9l^{34} 10m^{18} 2s^2 3p^6 4d^{10} 5f^{14} 6g^{18} 7h^{10}$,

где 180 электронов заполняют безузловые орбитали ($1s...10m$) и 60 электронов располагаются на орбиталях с одним узлом радиальной волновой функции ($2s...7h$).

Процедуру построения единой электронной конфигурации эндофуллерена удобно проиллюстрировать на примере соединения $Ar@C_{60}$. Конфигурация фуллерена C_{60} представлена выше, конфигурация же изолированного атома аргона Ar выглядит следующим образом:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6.$$

Итак, видно, что за исключением $3s$-орбитали состояния электронов в атоме аргона повторяют состояния в фуллерене в смысле набора квантовых чисел. В силу принципа запрета Паули в единой электронной конфигурации не может быть повторяющихся состояний. В данной работе предложено добавить к конфигурации фуллерена заполненное состояние $3s$, а остальные 16 «атомных» электронов распределить на не до конца заполненных орбиталях фуллерена. Согласно проведенным расчетам, с энергетической точки зрения более выгодным является заполнение $10m$-орбитали фуллерена. Таким образом, единая электронная конфигурация для эндоэдрального комплекса $Ar@C_{60}$, состоящая из 258 электронов, может быть представлена в виде:

$1s^2 2p^6 3d^{10} 4f^{14} 5g^{18} 6h^{22} 7i^{26} 8k^{30} 9l^{34} 10m^{34} 2s^2 3s^2 3p^6 4d^{10} 5f^{14} 6g^{18} 7h^{10}$.

Результаты расчетов и их обсуждение

Ниже представлены результаты самосогласованного расчета электронной структуры эндофуллеренов. На рис. 1, *б — г* приведены графики волновых функций электронных орбиталей эндоэдральных комплексов $He@C_{60}$, $Ne@C_{60}$

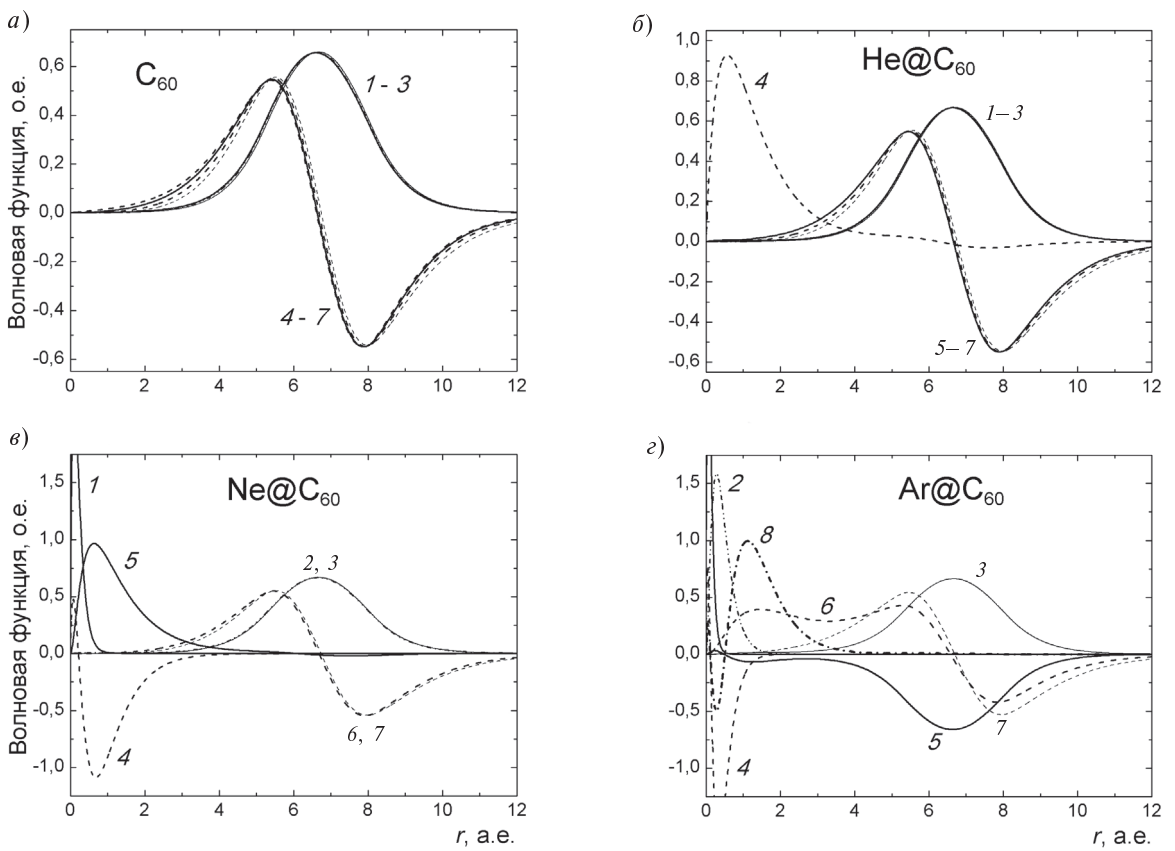


Рис. 1. Графики волновых функций изолированного фуллерена C_{60} (*а*), а также эндофуллеренов $He@C_{60}$ (*б*), $Ne@C_{60}$ (*в*) и $Ar@C_{60}$ (*г*), рассчитанных в приближении ХФ. Приведены волновые функции следующих орбиталей: $1s$ (*1*), $2p$ (*2*), $3d$ (*3*), $2s$ (*4*), $3p$ (*5*), $4d$ (*6*), $5f$ (*7*), $3s$ (*8*)

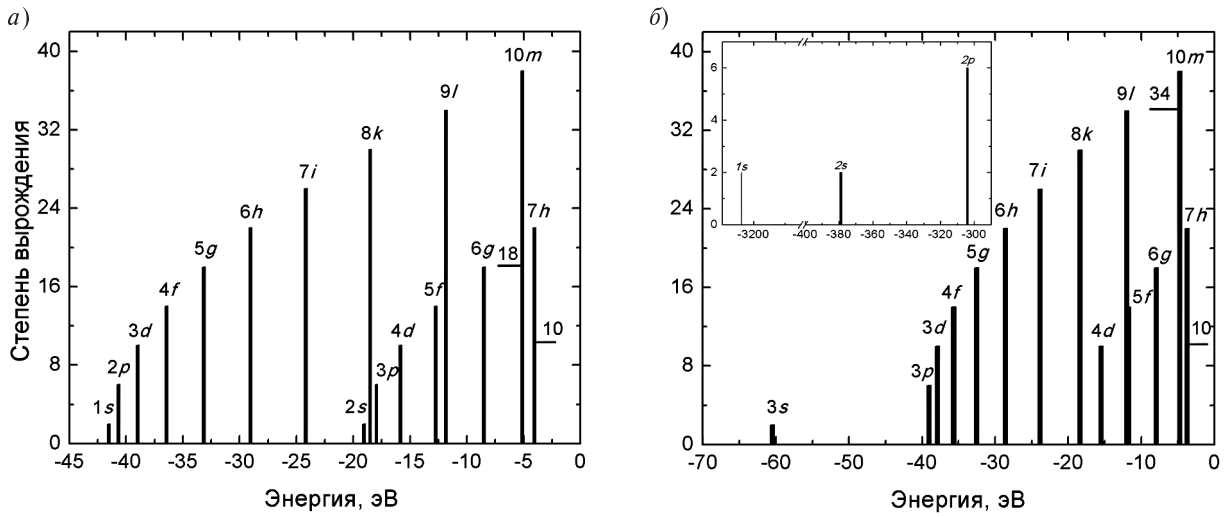


Рис. 2. Спектры одноэлектронных уровней энергии изолированного фуллерена C_{60} (*а*) и эндофуллерена $Ar@C_{60}$ (*б*), полученные в рамках приближения ХФ.

Цифрами 18, 34 (для внешнего безузлового состояния фуллерена C_{60} и эндофуллерена $Ar@C_{60}$ соответственно) и 10 (для внешнего одноузлового состояния в обоих случаях) обозначены числа заполнения не до конца заполненных состояний. Остальные состояния заполнены полностью

и $Ar@C_{60}$, рассчитанные в приближении ХФ. Наблюдается качественное изменение поведения некоторых функций по сравнению с функциями изолированного фуллерена (рис. 1, *а*). Из рис. 1, *б* видно, что в эндофуллерене $He@C_{60}$ волновая функция 2*s*-орбитали видоизменяется и локализуется вблизи места расположения атома гелия внутри фуллерена. Таким образом, она по поведению становится похожей на волновую функцию изолированного атома. Из рис. 1, *в*, *г* видно, что для комплексов $Ne@C_{60}$ и $Ar@C_{60}$ наблюдается подобная картина, причем увеличение заряда атома, внедренного внутрь фуллерена, усиливает этот эффект, т. е. большее число изначально фуллереноподобных волновых функций видоизменяется и становится по характеру зависимости похожим на атомные волновые функции.

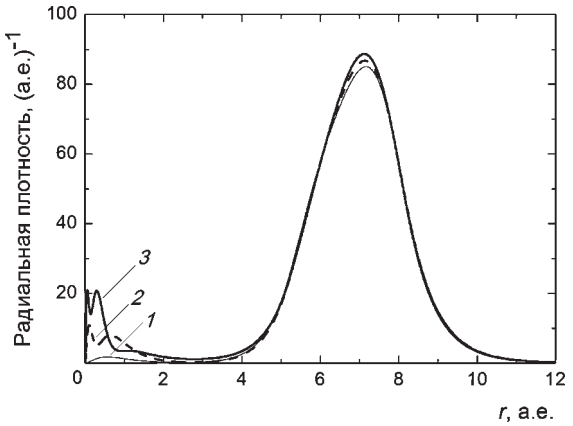


Рис. 3. Радиальная электронная плотность для эндофуллеренов $He@C_{60}$ (*1*), $Ne@C_{60}$ (*2*) и $Ar@C_{60}$ (*3*), рассчитанная в приближении ХФ

На рис. 2 приведены одноэлектронные уровни энергий фуллерена C_{60} и эндоэдрального комплекса $Ar@C_{60}$. Видно, что в эндофуллерене некоторые оболочки (1*s*, 2*s*, 2*p*, 3*s*) «проваливаются» по энергии и тем самым воспроизводят электронную структуру изолированного атома аргона.

На рис. 3 представлена радиальная электронная плотность рассмотренных эндофуллеренов. Помимо двух четко выраженных областей локализации электронной плотности вблизи начала координат и вблизи оболочки фуллерена наблюдается отличное от нуля значение плотности в области между ними. Данный эффект объясняется видоизменением волновых функций внутренних орбиталей фуллерена, что представлено на рис. 1, *б*—*г*.

В недавней работе [27] на примере соединения $Ar@C_{60}$ был затронут вопрос о гибридизации орбиталей атома и орбиталей фуллерена при образовании эндоэдрального комплекса. Электронная подсистема исследовалась в приближении локальной плотности, при этом подсистемы электронов внедренного атома и валентных элек-

тронов фуллерена рассматривались как две независимые взаимодействующие подсистемы. В результате расчетов было получено, что волновые функции валентных орбиталей атома аргона гибридизуются, т. е. происходит смешивание атомных функций и функций углеродного остова, что приводит к появлению дополнительных узлов в радиальной части волновой функции внешней, в данном случае 3*p*-орбитали. При этом, по мнению авторов [27], за счет слабого смешивания волновая функция гибридизованной 3*p*-орбитали лишь незначительно отличается от функции изолированного атома (рис. 4), что в дальнейшем должно приводить к сходному поведению парциальных сечений фотоионизации гибридизованной орбитали и соответствующей орбитали изолированного атома. Однако парциальное сечение гибридизованной 3*p*-орбитали эндофуллерена значительным образом отличается от парциального сечения 3*p*-орбитали изолированного атома аргона, что вызвано не гибридизацией, а частичным учетом корреляций при взаимодействии системы с излучением, реализованном в рамках нестационарной теории функционала плотности (НТФП).

В результате реализованного в данной работе самосогласованного расчета в приближении ХФ обнаружено явление сильной гибридизации орбиталей внедренного атома и внутренних электронных орбиталей фуллерена с сохранением симметрии волновых функций данных состояний. В частности, это было обнаружено для валентной 3*p*-орбитали атома аргона (кривая *1*, рис. 4) и 3*p*-орбитали фуллерена (кривая *3*, рис. 4). Предварительные расчеты сечения фотоионизации $Ar@C_{60}$ с учетом сильной гибридизации 3*p*-орбитали основного состояния системы, а также с более точным учетом корреляций, реализованным в рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО), предсказывают еще более значительное увеличение парциального сечения 3*p*-орбитали по сравнению с результатами, полученными в рамках НТФП.

При самосогласованном расчете вблизи ядра внедренного атома локализуются волновые функции внутренних орбиталей эндофуллерена (1*s*, 2*s*, 2*p*, 3*s*), при этом функции еще двух орбиталей (3*p*, 4*d*) значительным образом гибридизуются (кривые *1*, *2*, рис. 5). Остальные волновые функции не видоизменяются и не отличаются от функций изолированного фуллерена (кривые *3*, *4*, рис. 5).

Локализованные вблизи начала координат волновые функции электронов эндофуллерена практически совпадают с волновыми функциями в изолированном атоме аргона (рис. 6).

Таким образом, на основании проделанных расчетов можно сделать вывод о том, что обменное взаимодействие вносит существенный вклад в процесс гибридизации орбиталей внедренного атома и орбиталей фуллерена при образовании эндоэдральных соединений.

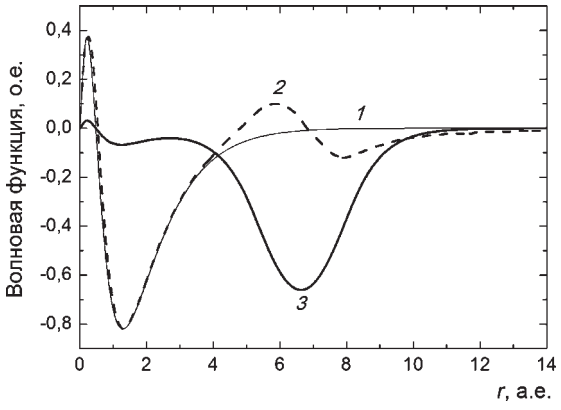


Рис. 4. Графики волновых функций 3*p*-орбитали изолированного атома аргона (*1*) и гибридизованной 3*p*-орбитали эндофуллерена $Ar@C_{60}$ с учетом локального [27] (*2*) и нелокального (*3*) обменных взаимодействий между электронами системы

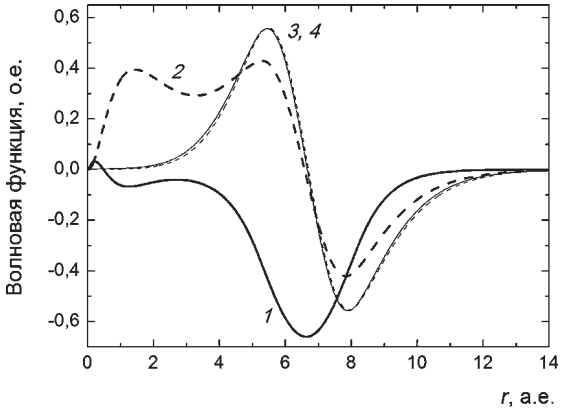


Рис. 5. Графики волновых функций 3*p*- (*1*, *3*) и 4*d*-орбиталей (*2*, *4*) комплекса $Ar@C_{60}$ (*1*, *2*) и изолированного фуллерена C_{60} (*3*, *4*), рассчитанных с учетом электростатического межэлектронного и обменного взаимодействий в рамках приближения ХФ

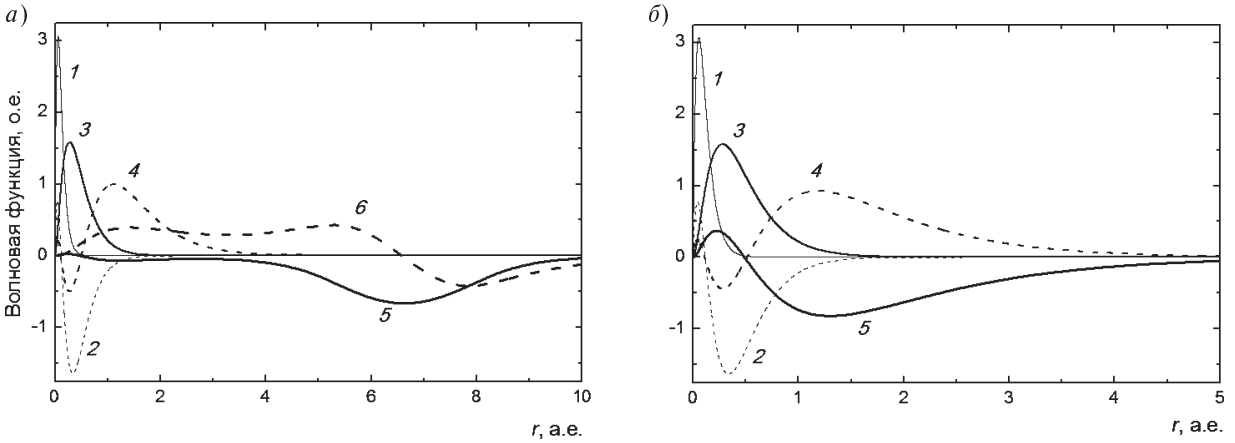


Рис. 6. Графики гибридизованных волновых функций комплекса $Ar@C_{60}$ (*а*) и волновых функций изолированного атома Ar (*б*), рассчитанных в приближении ХФ.
Приведены волновые функции следующих орбиталей: 1*s* (*1*), 2*s* (*2*), 2*p* (*3*), 3*s* (*4*), 3*p* (*5*), 4*d* (*6*)

В заключение приведем основные итоги проведенного теоретического исследования электронной структуры эндофуллеренов инертных газов на примере комплексов $He@C_{60}$, $Ne@C_{60}$ и $Ar@C_{60}$. В рамках приближения ХФ впервые выполнен самосогласованный расчет электронной структуры эндоэдральных соединений. Для этого построена единая электронная конфигурация, учитывающая все электроны внедренного атома и валентные электроны фуллерена.

В результате выявлено качественное изменение поведения некоторых волновых функций эндофуллерена по сравнению с функциями изолированного фуллерена — наблюдается их локализация вблизи места расположения атома внутри полости фуллерена. Этот эффект усиливается при увеличении заряда атома, внедренного внутрь фуллерена.

Помимо локализации волновых функций внутренних орбиталей эндофуллерена, при точном учете обменного взаимодействия, реализованном в рамках приближения ХФ, для соединения $Ar@C_{60}$ наблюдается значительная гибридизация валентной 3*p*-орбитали внедренного атома, а также 3*p*- и 4*d*-орбиталей фуллерена.

На основании сравнения расчетов электронной структуры в приближениях ХФ и локальной плотности сделан вывод о существенном перераспределении электронной плотности гибридизованных состояний при сохранении их симметрии в рамках приближения ХФ, и соответственно о необходимости учета нелокального обменного взаимодействия при расчете электронной структуры эндоэдральных комплексов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kroto, H.W.** C_{60}: Buckminsterfullerene [Text] / H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien [et al.] // Nature.— 1985.— Vol. 318.— P. 162–163.

2. **Heath, J.R.** Lanthanum complexes of spheroidal carbon shells [Text] / J.R. Heath, S.C. O'Brien, Q. Zhang [et al.] // J. Am. Chem. Soc.— 1985.— Vol. 107.— P. 7779–7780.

3. **Yasutake, Y.** Single molecular orientation switching of an endohedral metallofullerene [Text] / Y. Yasutake, Z. Shi, T. Okazaki [et al.] // Nano Lett.— 2000.— Vol. 5.— P. 1057–1060.

4. **Lee, J.** Bandgap modulation of carbon nanotubes by encapsulated metallofullerenes [Text] / J. Lee, H. Kim, S.J. Kahng [et al.] // Nature.— 2002.— Vol. 415.— P. 1005–1008.

5. **Shimada, T.** Transport properties of C_{78}, C_{90} and $Dy@C_{82}$ fullerenes-nanopeapods by field effect transistors [Text] / T. Shimada, Y. Ohno, T. Okazaki [et al.] // Physica E.— 2004.— Vol. 21.— P. 1089–1092.

6. **Hiroshiba, N.** C_{60} field transistor with electrodes modified by $La@C_{82}$ [Text] / N. Hiroshiba, K. Tanigaki, R. Kumashiro [et al.] // Chem. Phys. Lett.— 2004.— Vol. 400.— P. 235–238.

7. **Harneit, W.** Room temperature electrical detection of spin coherence in C_{60} [Text] / W. Harneit, C. Boehme, S. Schaefer [et al.] // Phys. Rev. Lett.—

2007.— Vol. 98.— P. 216601.

8. **Harneit, W.** Architectures for a spin quantum computer based on endohedral fullerenes [Text] / W. Harneit, C. Meyer, A. Weidinger [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b).— 2002.— Vol. 98.— P. 453–461.

9. **Hartman, K.B.** Detecting and treating cancer with nanotechnology [Text] / K.B. Hartman, L.J. Wilson, M.G. Rosenblum // Molecular Diagnosis & Therapy.— 2008.— Vol. 12.— P. 1–14.

10. **Smith, B.W.** Tumbling atoms and evidence for charge transfer in $La_2@C_{80}$@SWNT [Text] / B.W. Smith, D.E. Luzzi, Y. Achiba // Chem. Phys. Lett.— 2000.— Vol. 331.— P. 137–142.

11. **Takeda, A.** Superconductivity of doped $Ar@C_{60}$ [Text] / A. Takeda, Y. Yokoyama, S. Ito [et al.] // Chem. Commun.— 2006.— Vol. 8.— P. 912–914.

12. **Yakigaya, K.** Superconductivity of doped $Ar@C_{60}$ [Text] / K. Yakigaya, A. Takeda, Y. Yokoyama [et al.] // New J. Chem.— 2007.— Vol. 31.— P. 973–979.

13. **Cormier, E.** ATI of complex systems: Ar and C_{60} [Text] / E. Cormier, P.-A. Hervieux, R. Wiehle [et al.] // Eur. Phys. J. D.— 2003.— Vol. 26.— P. 83–90.

14. **Connerade, J.-P.** Dynamical screening of a confined atom by a fullerene [Text] / J.-P. Connerade, A.V. Solov'yov // J. Phys. B.— 2005.— Vol. 38.— P. 807–813.

15. **Lo, S.** Dynamical screening of an endohedral atom [Text] / S. Lo, A.V. Korol, A.V. Solov'yov // Phys. Rev. A.— 2009.— Vol. 79.— P. 063201.

16. **Connerade, J.-P.** On the nature and origin of confinement resonances [Text] / J.-P. Connerade, V.K. Dolmatov, S.T. Manson // J. Phys. B.— 2000.— Vol. 33.— P. 2279–2285.

17. **Wendin, G.** Many-electron effects in $Ba@C_{60}$: Collective response and molecular effects in optical conductivity and photoionization [Text] / G. Wendin, B. Wästberg // Phys. Rev. B.— 1993.— Vol. 48.— P. 14764–14767.

18. **Puska, M.J.** Photoabsorption of atoms inside C_{60} [Text] / M.J. Puska, R.M. Niemenen // Phys. Rev. A.— 1993.— Vol. 47.— P. 1181–1186; Phys. Rev. A.— 1994.— Vol. 49.— P. 629 (Errata).

19. **Amusia, M.Ya.** Photoionization of the outer electrons in noble gas endohedral atoms [Text] / M.Ya. Amusia, A.S. Baltenkov, L.V. Chernysheva // J. Exp. Theor. Phys.— 2008.— Vol. 107.— P. 180–189.

20. **Madjet, M.E.** Photoionization of Xe inside C_{60}: Atom-fullerene hybridization, giant cross-section enhancement and correlation confinement resonances [Text] / M.E. Madjet, T. Renger, D.E. Hopper [et al.] // Phys. Rev. A.— 2010.— Vol. 81.— P. 013202.

21. **Mitsuke, K.** $4d \rightarrow 4f$ dipole resonance of the metal atom encapsulated in a fullerene cage: $Ce@C_{82}$ [Text] / K. Mitsuke, T. Mori, J. Kou [et al.] // J. Chem. Phys.— 2005.— Vol. 122.— P. 064304.

22. **Mitsuke, K.** Photoion yield curves of $Dy@C_{82}$ in the vacuum UV region [Text] / K. Mitsuke, T. Mori, J. Kou [et al.] // Int. J. Mass Spectrom.— 2005.— Vol. 243.— P. 121–125.

23. **Katayanagi, H.** The $4d–4f$ dipole resonance of the Pr atom in an endohedral metallofullerene, $Pr@C_{82}$ [Text] / H. Katayanagi, B.P. Kafle, J. Kou [et al.] // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.— 2008.— Vol. 109.— P. 1590–1598.

24. **Müller, A.** Photoionization of the endohedral fullerene ions $Sc_3N@C_{80}^+$ and $Ce@C_{82}^+$ by synchrotron radiation [Text] / A. Müller, S. Schippers, R.A. Phaneuf [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser.— 2007.— Vol. 88.— P. 012038.

25. **Müller, A.** Significant redistribution of Ce $4d$ oscillator strength observed in photoionization of endohedral $Ce@C_{82}^+$ ions [Text] / A. Müller, S. Schippers, M. Habibi [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2008.— Vol. 101.— P. 133001.

26. **Korol, A.V.** Confinement resonances in the photoionization of endohedral atoms: myth or reality? [Text] / A.V. Korol, A.V. Solov'yov // J. Phys. B.— 2010.— Vol. 43.— P. 201004.

27. **Madjet, M.E.** Giant enhancement in low energy photoemission of Ar confined in C_{60} [Text] / M.E. Madjet, H.S. Chakraborty, J.-M. Rost [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2007.— Vol. 99.— P. 243003.

28. **Amusia, M.Ya.** Interference effects of noble-gas atoms outer s-subshell [Text] / M.Ya. Amusia, V.K. Ivanov, N.A. Cherepkov [et al.] // Phys. Lett. A.— 1972.— Vol. 40.— P. 361.

29. **Amusia, M.Ya.** Many-electron correlations in the scattering processes [Text] / M.Ya. Amusia, N.A. Cherepkov // Case Stud. Atom. Phys. (Amsterdam: North-Holland)— 1975.— Vol. 5.— P. 47–179.

30. **Froese Fischer, C.** Computational atomic structure: an MCHF approach [Text] / C. Froese Fischer, T. Brage, P. Jönsson.— Bristol: Institute of Physics Publishing, 1997.— 279 p.

31. **Hartree, D.R.** The calculation of atomic structures [Text] / D.R. Hartree.— New York: Wiley & Sons, 1957.— 181 p.

32. **Yabana, K.** Electronic structure of C_{60} in a spherical basis [Text] / K. Yabana, G.F. Bertsch // Physica Scripta.— 1993.— Vol. 48.— P. 633–637.

33. **Polozkov, R.G.** Stability of metallic hollow cluster systems: Jellium model approach [Text] / R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Verkhovtsev [et al.] / / Phys. Rev. A.— 2009.— Vol. 79.— P. 063203.

34. **Troullier, N.** Structural and electronic properties of C_{60} [Text] / N. Troullier, J. L. Martins // Phys. Rev. B.— 1992.— Vol. 46.— P. 1754.

35. **Martins, J.L.** Analysis of occupied and empty electronic states in C_{60} [Text] / J.L. Martins, N. Troullier, J.H. Weaver // Chem. Phys. Lett.— 1991.— Vol. 180.— P. 457.

36. **Haddon, R.C.** Electronic structure and bonding in icosahedral C_{60} [Text] / R.C. Haddon, L.E. Brus, K. Raghavachari // Chem. Phys. Lett.— 1986.— Vol. 125— P. 459–464.

37. **Ivanov, V.K.** Photoionization cross sections of the fullerenes C_{20} and C_{60} calculated in a simple spherical model [Text] / V.K. Ivanov, G.Yu. Kashenock, R.G. Polozkov [et al.] // J. Phys. B.— 2001.— Vol. 34.— P. L669–L677.

УДК 517.444

В.Н. Козлов, П.А. Трофимов, А.И. Акимов

ОБРАТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ХАНКЕЛЯ ДЛЯ СМЕШАННОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ НА КОНЕЧНОМ ИНТЕРВАЛЕ

Преобразование Ханкеля применяется при решении задач переноса для тел с осевой симметрией. Оно разработано и успешно используется для различных интервалов (см., например, [1–3, 5, 7]), причем основное внимание уделено областям вида $(0, a)$ как наиболее распространенным. В данной работе разрабатывается способ, применимый к решению некоторых задач на области $0 < b < a$, с граничными условиями третьего и первого родов соответственно. Подобные задачи возникают при изучении распределения тепла для полого цилиндра в производстве изделий из композиционных материалов в авиационной промышленности и космической технике.

Преобразование Ханкеля определяется как

$$\overline{f}(\xi_i) = \int_b^a r f(r) L_\nu(\xi_i r) dr; \qquad (1)$$

здесь $f(r)$ удовлетворяет условиям Дирихле на интервале $[b, a]$, и существует разложение

$$f(r) = \sum_i c_i L_\nu(\xi_i r), \qquad (2)$$

где $\nu > -1$, $L_\nu(\xi_i r) = J_\nu(\xi_i r) G_\nu(\xi_i a) - J_\nu(\xi_i a) G_\nu(\xi_i r)$. Здесь $J_\nu(\xi_i r)$, $G_\nu(\xi_i r)$ — соответственно функции Бесселя первого и третьего родов порядка ν, ξ_i — положительные корни трансцендентного уравнения

$$h L_\nu(\xi b) + \xi L'_\nu(\xi b) = 0, \qquad (3)$$

где h — относительная теплопроводность и $h + \nu > 0$. Само уравнение соответствует граничному условию третьего рода. Будем считать, что ряд равномерно сходится и суммирование ведется по корням ξ_i. Внесем ряд уточнений, поскольку в определениях рода функции Бесселя присутствует некоторая неопределенность. Так, в монографии [2] функцией Бесселя второго рода называется функция

$$G_\nu(z) = 1/2\pi \operatorname{cosec} \nu\pi (J_{-\nu}(z) - e^{-i\nu\pi} J_\nu(z)),$$

которая в другой монографии [4] определена как функция Ханкеля третьего рода, правда без множителя $1/2\pi$. В свою очередь в книге [7] функция второго рода определена как

$$Y_\nu(z) = \operatorname{cosec} \nu\pi (J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)),$$

что совпадает с обозначением Вебера (принятым, по крайней мере, в [4]). В нашей работе будем считать, что $Y_\nu(z)$ — бесселева функция второго рода, $G_\nu(z)$ — бесселева функция третьего рода.

Можно доказать ортогональность с весом $\rho(r) = r$ на интервале (b, a) для системы функций $L_\nu(\xi_1 r)$, $L_\nu(\xi_2 r)$, $L_\nu(\xi_3 r)$, ...

Для $\xi_i \neq \xi_j$ несложно получить следующий результат (см. интеграл Ломмеля):

$$\int_b^a r L_\nu(\xi_i r) L_\nu(\xi_j r) dr = \frac{bh}{\xi_j^2 - \xi_i^2} \times$$

$$\times \left[L_\nu(\xi_i b) L_\nu(\xi_j b) - L_\nu(\xi_i b) L_\nu(\xi_j b) \right] \equiv 0.$$

Заметим, что при совпадении корней ξ_i и ξ_j нам фактически необходимо вычислить квадрат нормы:

$$\left\| L_\nu(\xi_i r) \right\|^2 = \int_b^a r L_\nu^2(\xi_i r) dr =$$

$$= \frac{r^2}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\nu^2}{\xi_i^2 r^2} \right) L_\nu^2(\xi_i r) + L_\nu'^2(\xi_i r) \right\}_b^a =$$

$$= \frac{a^2}{2} L_\nu'^2(\xi_i a) + \frac{b^2}{2} L_\nu^2(\xi_i b)\left(\frac{\nu^2}{\xi_i^2 b^2} - 1 - \frac{h^2}{\xi_i^2}\right) =$$

$$= \frac{b^2}{2} L_\nu^2(\xi_i b)\left(\frac{\nu^2}{\xi_i^2 b^2} - 1 - \frac{h^2}{\xi_i^2}\right) + \frac{1}{2\xi_i^2},$$

так как $L_\nu'(\xi_i a) = \frac{1}{\xi_i a}$ (см. [2, с. 597]).

Следовательно, система функций ортогональна с весом r, т. е.

$$\int_b^a r L_\nu(\xi_i r) L_\nu(\xi_j r) dr =$$

$$= \begin{cases} 0, \text{если } \xi_i \neq \xi_j, \\ \frac{b^2}{2} L_\nu^2(\xi_i b)\left(\frac{\nu^2}{\xi_i^2 b^2} - 1 - \frac{h^2}{\xi_i^2}\right) + \frac{1}{2\xi_i^2}, \text{если } \xi_i = \xi_j. \end{cases}$$

Возвращаясь к разложению (2), получаем с учетом определения (1):

$$c_i = \frac{\overline{f}(\xi_i)}{\left\| L_\nu(\xi_i r) \right\|^2} = \frac{2\xi_i^2 \overline{f}(\xi_i)}{b^2 L_\nu^2(\xi_i b)\left(\frac{\nu^2}{b^2} - \xi_i^2 - h^2\right) + 1}. \quad (4)$$

Таким образом, мы приходим к формуле обращения преобразования Ханкеля для смешанной краевой задачи:

$$f(r) = \sum_i \frac{2\xi_i^2 \overline{f}(\xi_i)}{b^2 L_\nu^2(\xi_i b)\left(\frac{\nu^2}{b^2} - \xi_i^2 - h^2\right) + 1} L_\nu(\xi_i r), \quad (5)$$

где суммирование осуществляется по положительным корням ξ_i уравнения (3).

Рассмотрим теперь частный случай, соответствующий граничным условиям первого рода.

Перепишем уравнение (3) в виде

$$L_\nu(\xi_i b) = -\frac{\xi_i}{h} L_\nu'(\xi_i b). \quad (6)$$

Распишем знаменатель выражения (4):

$$b^2\left\{\frac{\nu^2}{b^2} - \xi_i^2\right\} L_\nu^2(\xi_i b) - h^2 b^2 L_\nu^2(\xi_i b) + 1 =$$

$$= b^2\left\{\frac{\nu^2}{b^2} - \xi_i^2\right\} L_\nu^2(\xi_i b) - b^2 \xi_i^2 L_\nu'^2(\xi_i b) + 1.$$

Устремим $h \to \infty$, тогда первое слагаемое стремится к нулю ввиду $L_\nu(\xi_i b) \to 0$ и условие (6) вырождается в условие первого рода

$$L_\nu(\xi_i b) = 0. \quad (7)$$

Заметим, что это условие теперь будет определять корни ξ_i нашей задачи.

Принимая во внимание уравнение (7) и выражение

$$L_\nu'(\xi_i b) = \frac{J_\nu(\xi_i a)}{\xi_i b J_\nu(\xi_i b)}$$

(см. [2]), мы преобразуем знаменатель к виду

$$-\frac{J_\nu^2(\xi_i a)}{J_\nu^2(\xi_i b)} + 1.$$

В итоге приходим к выражению

$$f(r) = \sum_i \frac{2\xi_i^2 J_\nu^2(\xi_i b)\overline{f}(\xi_i)}{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)} L_\nu(\xi_i r), \quad (8)$$

которое и определяет решение частной задачи.

Это формула неявно содержится в книге [7, с. 522], где для этого случая она приводится (с учетом наших обозначений) как

$$\overline{f}_1(\xi_i) = \int_b^a r f(r) B_\nu(\xi_i r) dr, \quad a > b,$$

где $B_\nu(\xi_i r) = J_\nu(\xi_i r) Y_\nu(\xi_i b) - J_\nu(\xi_i b) Y_\nu(\xi_i r)$; ξ_i — положительные корни уравнения

$$J_\nu(\xi_i a) Y_\nu(\xi_i b) = J_\nu(\xi_i b) Y_\nu(\xi_i a) \quad (9)$$

($Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z)\cos\nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin\nu\pi}$ — функция Бесселя второго рода порядка ν). Там же приводится формула обращения вида

$$f(r) = \frac{\pi^2}{2} \sum_i \frac{\xi_i^2 J_\nu^2(\xi_i a)\overline{f}_1(\xi_i)}{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)} B_\nu(\xi_i r).$$

Нетрудно заметить, что автором [7] используется ядро, отличное от $L_\nu(\xi_i r)$; вместо бесселевой функции третьего рода взята функция второго рода и, кроме того, в ядре применяются значения от b.

Воспользуемся аналогией и вслед за результатами, полученными в [7, с. 132–133], выведем формулу обратного преобразования для ядра

$$B_\nu(\xi_i r) = J_\nu(\xi_i r) Y_\nu(\xi_i a) - J_\nu(\xi_i a) Y_\nu(\xi_i r). \quad (10)$$

Квадрат его нормы имеет вид:

$$\left\|B_\nu(\xi_i r)\right\|^2 = \int_b^a r B_\nu^2(\xi_i r)dr =$$

$$= \frac{1}{2}\left[a^2 B_{\nu+1}^2(\xi_i a) - b^2 B_{\nu+1}^2(\xi_i b)\right]. \qquad (11)$$

Используя разность

$$J_{\nu+1}(x)Y_\nu(x) - J_\nu(x)Y_{\nu+1}(x) = \frac{2}{\pi x}, \qquad (12)$$

получим формулу

$$B_{\nu+1}(\xi_i a) = \frac{2}{\pi \xi_i a}. \qquad (13)$$

Далее, применяя выражение

$$Y_\nu(\xi_i a) = \frac{J_\nu(\xi_i a)Y_\nu(\xi_i b)}{J_\nu(\xi_i b)}$$

из уравнения (9), имеем равенство

$$B_{\nu+1}(\xi_i b) = J_{\nu+1}(\xi_i b)Y_\nu(\xi_i a) - J_\nu(\xi_i a)Y_{\nu+1}(\xi_i b) =$$

$$= \frac{J_{\nu+1}(\xi_i b)J_\nu(\xi_i a)}{J_\nu(\xi_i b)} - J_\nu(\xi_i a)Y_{\nu+1}(\xi_i b) =$$

$$= \frac{J_\nu(\xi_i a)}{J_\nu(\xi_i b)}\left[J_{\nu+1}(\xi_i b)Y_\nu(\xi_i b) - J_\nu(\xi_i b)Y_{\nu+1}(\xi_i b)\right].$$

С учетом тождества (12) оно дает формулу

$$B_{\nu+1}(\xi_i b) = \frac{J_\nu(\xi_i a)}{J_\nu(\xi_i b)}\frac{2}{\pi \xi_i b}. \qquad (14)$$

Подставляем значения (13), (14) в выражение

$$\left\|B_\nu(\xi_i r)\right\|^2 = \int_b^a r B_\nu^2(\xi_i r)dr = \frac{2}{\pi^2 \xi_i^2}\frac{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)}{J_\nu^2(\xi_i b)}.$$

Наконец, получим выражение

$$f(r) = \frac{\pi^2}{2}\sum_i \frac{\xi_i^2 J_\nu^2(\xi_i b)\overline{f}_2(\xi_i)}{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)} B_\nu(\xi_i r), \qquad (15)$$

где $\overline{f}_1(\xi_i) = \int_b^a r f(r) B_\nu(\xi_i r)dr$.

Покажем тождественность преобразований (8) и(15), для чего рассмотрим связь между ядрами $B_\nu(\xi_i r)$ и $L_\nu(\xi_i r)$.

Сведем функцию Бесселя $G_\nu(z)$ к $Y_\nu(z)$, применяя $e^{-i\nu\pi} = \cos\nu\pi - i\sin\nu\pi$:

$$G_\nu(z) = -\frac{1}{2}\pi\frac{J_\nu(z)\cos\nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin\nu\pi} + \frac{1}{2} =$$

$$= -\frac{1}{2}\pi\left(Y_\nu(z) - iJ_\nu(z)\right);$$

$$Y_\nu(z) = -\frac{2}{\pi}G_\nu(z) + iJ_\nu(z). \qquad (16)$$

Таким образом, из ядра (10) и (16)

$$B_\nu(\xi_i r) = \frac{2}{\pi}\left[J_\nu(\xi_i a)G_\nu(\xi_i r) - J_\nu(\xi_i r)G_\nu(\xi_i a)\right];$$

$$B_\nu(\xi_i r) = -\frac{2}{\pi}L_\nu(\xi_i r). \qquad (17)$$

Формула (15) преобразуется к виду

$$f(r) = \frac{\pi^2}{2}\sum_i \int_b^a r f(r)\left[-\frac{2}{\pi}L_\nu(\xi_i r)\right]dr \times$$

$$\times \frac{\xi_i^2 J_\nu^2(\xi_i b)}{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)}\left[-\frac{2}{\pi}L_\nu(\xi_i r)\right];$$

$$f(r) = \sum_i \frac{2\xi_i^2 J_\nu^2(\xi_i b)\overline{f}(\xi_i)}{J_\nu^2(\xi_i b) - J_\nu^2(\xi_i a)}L_\nu(\xi_i r),$$

что совпадает с частным случаем (8), выведенным выше.

Таким образом, показана тождественность преобразований (8) и (15).

Перейдем к исследованию самого преобразования.

Известно, что функции Бесселя первого и второго родов $J_\nu(z)$ и $Y_\nu(z)$ вещественнозначны, в том числе и для комплексных аргументов. В силу формулы (17) получаем, что

$$L_\nu(\xi_i r) = -\frac{\pi}{2}\left(J_\nu(\xi_i r)Y_\nu(\xi_i a) - J_\nu(\xi_i a)Y_\nu(\xi_i r)\right).$$

Таким образом, функция $L_\nu(\xi_i r)$ принимает только вещественные значения.

Уравнение (3) имеет бесконечное количество корней ξ_i. Этот факт следует хотя бы из того, что при больших аргументах любое решение Бесселя (в том числе и $L_\nu(\xi_i r)$) весьма мало отличается от затухающей синусоиды

$$y=\frac{A}{\sqrt{x}}\sin(x+\omega)+O\left(x^{-3/2}\right), \qquad (18)$$

где $A=\text{const}$, $\omega=\text{const}$ [9, с. 265].

Таким образом, воспользовавшись функцией

$$L_\nu(\xi_i r)\approx\frac{A}{\sqrt{\xi_i r}}\sin(\xi_i r+\omega),$$

получаем из уравнения (3) два уравнения:

$$\frac{A}{\sqrt{\xi_i r}}\sin(\xi_i r+\omega)+\xi_i\cos(\xi_i r+\omega)=0;$$

$$B\sin(\xi_i r+\theta)=0,$$

где $B=\text{const}$.

Последнее уравнение имеет бесконечное число корней ξ_i при $i\to\infty$.

Выясним природу корней функции

$$hL_\nu(\xi b)+\xi L'_\nu(\xi b).$$

Для функций $J_\nu(z)$ и $Y_\nu(z)$, ввиду асимптотических формул [9, с. 265]

$$J_\nu(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin\left(x-\frac{\nu\pi}{2}+\frac{\pi}{4}\right)+O\left(x^{-3/2}\right),$$

$$Y_\nu(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin\left(x-\frac{\nu\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right)+O\left(x^{-3/2}\right),$$

корни будут стремиться при возрастании аргументов к значениям соответственно

$$x=\pi n+\frac{\nu\pi}{2}-\frac{\pi}{4};$$

$$x=\pi n+\frac{\nu\pi}{2}+\frac{\pi}{4}.$$

Из асимптотической формулы (18) следует, что любое решение уравнения Бесселя имеет бесконечное множество положительных корней и эти корни близки к корням функции $\sin(x+\omega)$.

Таким образом, для функции $L_\nu(\lambda_n b)$ для достаточно больших n корни близки к числам вида $\lambda_n b=\pi n-\omega$, где n — целое. В дальнейшем нас будут интересовать только положительные корни $L_\nu(\lambda_n b)$. Можно показать, что для достаточно больших значений n вблизи каждого числа $\lambda_n b$ лежит лишь один корень.

Теперь обратимся к корням функции $L'_\nu(\eta_n b)$. В силу теоремы Ролля между двумя каждыми последовательными корнями функции $L_\nu(\eta_n b)$ лежит по крайней мере один корень $L'_\nu(\eta_n b)$. Следовательно функция $L'_\nu(\eta_n b)$, как и $L_\nu(\eta_n b)$, имеет бесконечное множество положительных корней.

Случай кратного корня, т. е. когда

$$L_\nu(\eta_n b)=0 \text{ и } L'_\nu(\eta_n b)=0,$$

невозможен; в силу теоремы о единственности решения дифференциального уравнения следовало бы, что $L_\nu(\eta r)\equiv 0$, а это, конечно, неверно.

Наконец, рассмотрим функцию

$$hL_\nu(\xi b)+\xi L'_\nu(\xi b).$$

Как показано выше, функции $L_\nu(\xi b)$ и $L'_\nu(\xi b)$ не имеют общих корней ($\xi b>0$); $L_\nu(\xi b)$ при переходе через корень обязательно меняет знак. Пусть λ_1, λ_2, ..., λ_n, ... — положительные корни $L_\nu(\xi b)$, расположенные в порядке возрастания. Следовательно, $L'_\nu(\lambda_n b)\neq 0$, но

$$\left[hL_\nu(\xi b)+\xi L'_\nu(\xi b)\right]_{\xi=\lambda_n}=\lambda_n L'_\nu(\lambda_n b).$$

Заключаем, что функция $hL_\nu(\xi b)+\xi L'_\nu(\xi b)$ попеременно положительна и отрицательна при $\xi=\lambda_1$, λ_2, ..., λ_n, ... и, значит, обращается в нуль по крайней мере по одному разу между корнями λ_1, λ_2, ..., λ_n, ... Таким образом, доказано существование бесконечного множества положительных корней для функции $hL_\nu(\xi b)+\xi L'_\nu(\xi b)$.

Покажем, что ряд $f(r)=\sum_i c_i L_\nu(\xi_i r)$ равномерно сходится. Для этого докажем следующее утверждение:

Если $\nu\geq -1/2$ *и для всех достаточно больших* n

$$|c_n|\leq\frac{c}{\xi_n^{1+\varepsilon}},$$

где $\varepsilon>0$ *и* c *— постоянные, то ряд*

$$c_1 L_\nu(\xi_1 r)+c_2 L_\nu(\xi_2 r)+\ldots+c_n L_\nu(\xi_n r)+\ldots$$

сходится абсолютно и равномерно на интервале $0<b<a$.

Итак, при $\nu\geq -1/2$ функция $L_\nu(\xi_i r)$ ограничена при $r\to b\neq 0$, что следует из непрерывности функций $J_\nu(z)$ и $G_\nu(z)$ в точке $\xi_i b$; с другой

стороны в силу асимптотической формулы (18) она ограничена при больших аргументах, а значит ограничена для всех исследуемых аргументов. Но тогда

$$\left|L_\nu(\xi_n r)\right| \le P,\ (P = \text{const});$$

$$\left|c_n L_\nu(\xi_n r)\right| \le |c_n| P;$$

и в силу условия $|c_n| \le \frac{c}{\xi_n^{1+\varepsilon}}$ получаем неравенство

$$\left|c_n L_\nu(\xi_n r)\right| \le \frac{cP}{\xi_n^{1+\varepsilon}}.$$

С помощью той же асимптотической формулы нетрудно получить при $n \to \infty$ неравенство

$$\xi_n - \xi_m > \frac{\pi}{r}$$

в случае $n > m$.

Таким образом,

$$\xi_n > \xi_m + (n-m) = n + h,$$

$h = \text{const}$. Поэтому если число n велико, то

$$\xi_n \ge \frac{1}{2} n \quad \text{и} \quad \frac{1}{\xi_n} \le \frac{2}{n}.$$

Тогда для больших значений n выполняется неравенство

$$\left|c_n L_\nu(\xi_n r)\right| \le \frac{H}{n^{1+\varepsilon}},\ H = \text{const},$$

где $\frac{H}{n^{1+\varepsilon}}$ — член сходящегося числового ряда.

Следовательно, ряд $\sum_n c_n L_\nu(\xi_n r)$ сходится абсолютно и равномерно.

Для разрешения вопроса о скорости убывания коэффициентов (4) разложения Фурье — Бесселя оценим вначале поведение образа Ханкеля функции (1). Вследствие ограниченности функции $L_\nu(\xi_i r)$ при больших аргументах справедлива оценка

$$\left|\int_b^a r^{1/2} L_\nu(r)\,dr\right| < c,$$

где c — постоянная, не зависящая от r, она лежит в интервале $(0, \infty)$.

Данная оценка следует из неравенства [4, с. 653]

$$\left|\int_b^a r^{1/2} J_\nu(r)\,dr\right| < c_1,$$

определения функции

$$L_\nu(\xi_i r) = J_\nu(\xi_i r) G_\nu(\xi_i a) - J_\nu(\xi_i a) G_\nu(\xi_i r)$$

и неравенства

$$\left|\int_b^a r^{1/2} G_\nu(r)\,dr\right| < c_2,$$

которое следует из выражения

$$G_\nu(r) = \frac{\pi i}{2}\left(J_\nu(r) + i Y_\nu(r)\right)$$

и неравенства

$$\left|\int_b^a r^{1/2} Y_\nu(r)\,dr\right| < c_3.$$

Последнее неравенство есть следствие асимптотической формулы [4, с. 222]

$$Y_\nu(r) = \left(2/\pi r\right)^{1/2} \times$$

$$\times\left[\sin(r - 1/2\,\nu\pi - 1/4\,\pi)\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m(\nu, 2m)/(2r)^{2m} + \right.$$

$$\left. + \cos(r - 1/2\,\nu\pi - 1/4\,\pi)\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m(\nu, 2m+1)/(2r)^{2m+1}\right].$$

Пусть, далее,

$$r^{1/2} f(r) = \psi_1(r) - \psi_2(r),$$

где $\psi_1(r)$ и $\psi_2(r)$ монотонны на интервале (b, a); тогда существует такое число ς, что

$$\left|\int_b^a \psi_1(r) r^{1/2} L_\nu(\xi r)\,dr\right| =$$

$$= \left|\psi_1(a)\int_b^{\zeta} r^{1/2} L_\nu(\xi r)\,dr + \psi_1(b)\int_{\zeta}^{a} r^{1/2} L_\nu(\xi r)\,dr\right| <$$

$$< 2c\left\{|\psi_1(a)| + |\psi_1(b)|\right\}\xi^{-3/2} = O\left(\xi^{-3/2}\right).$$

Очевидно, что для $\psi_2(r)$ получаем тот же результат.

Таким образом,

$$\overline{f}(\xi_i) = \int_b^a r f(r) L_\nu(\xi_i r)\,dr = O\left(\xi_i^{-3/2}\right).$$

При рассмотрении коэффициентов c_i будем пользоваться асимптотической формулой (18) для $L_\nu(\xi_i r)$. Итак, для c_i, представленных формулой (4), оценку будем выполнять следующим образом. Подставим в формулу c_i соответствующие оценки для скорости убывания:

$$\frac{2\xi_i^2 O\left(\xi^{-3/2}\right)}{\left(Ab\frac{1}{\sqrt{\xi b}}\sin(\xi_i b+\omega)+O\left(\xi^{-3/2}\right)\right)^2\left(\frac{\nu^2}{b^2}-\xi_i^2-h^2\right)+1}.$$

После возведения в квадрат первого множителя знаменателя оставляем слагаемые, скорость убывания которых минимальна, далее упрощаем выражение, отбрасывая постоянные, так как они на скорость убывания не влияют, т. е.

$$\frac{O\left(\xi^{1/2}\right)}{\left[\frac{1}{\xi}\sin^2(\xi_i b+\omega)+\sin(\xi_i b+\omega)O\left(\xi^{-3/2}\right)\right]\left(\frac{\nu^2}{b^2}-\xi_i^2-h^2\right)};$$

наконец, раскроем скобки в знаменателе и оставим самые медленноубывающие части:

$$\frac{O\left(\xi^{1/2}\right)}{-\xi_i\sin^2(\xi_i b+\omega)+O\left(\xi^{1/2}\right)}.$$

Аналогично продолжаем, тогда имеем $\frac{O\left(\xi^{1/2}\right)}{O(\xi)}$ и, как следствие, получаем $O\left(\xi^{-1/2}\right)$.

Таким образом, скорость убывания последовательности (c_i) коэффициентов разложения Фурье — Бесселя составляет $O\left(\xi^{-1/2}\right)$.

Решим вопрос об убывании членов исследуемого ряда, для чего рассмотрим общий член ряда — $c_i L_\nu(\xi_i r)$. Как нам известно, $L_\nu(\xi_i r)$ асимптотически приближается выражением (18) для больших аргументов. Следовательно, скорость убывания может быть вычислена как

$$A\frac{1}{\sqrt{\xi r}}\sin(\xi_i r+\omega)O\left(\xi^{-1/2}\right)+O\left(\xi^{-2}r^{-3/2}\right),$$

т. е. не менее $O\left(\xi^{-1}\right)$.

Оценим, наконец, остаток ряда Фурье — Бесселя для достаточно больших значений n, воспользовавшись рассуждениями для общего члена ряда, а именно

$$|R_n(r,f)|=\left|\sum_{k=n+1}^{\infty}c_k L_\nu(\xi_k r)\right|\le\sum_{k=n+1}^{\infty}\left|c_k L_\nu(\xi_k r)\right|\le$$

$$\le\int_k^{\infty}\left(A\frac{\sin(x)}{x}+B\frac{1}{x^2}\right)dx=\frac{A\pi}{2}-A\,\mathrm{Si}(k)+\frac{B}{k},,$$

где A, B — постоянные.

Таким образом,

$$\max\left|f(r)-S_n(r,f)\right|=O\left(\frac{1}{n}-\mathrm{Si}(n)\right)$$

при $n\to\infty$.

И в заключение для случая $\nu=1$ найдем образ Ханкеля функции $\frac{r^2-a^2}{r}$, который обозначим как $H_1\left(\frac{r^2-a^2}{r}\right)$.

Воспользуемся уже известными формулами [2, с. 113]:

$$\int_b^a(r^2-a^2)J_1(\xi_i r)dr=$$

$$=\frac{1}{\xi_i^2}\left[2rJ_1(\xi_i r)-\xi_i(r^2-a^2)J_0(\xi_i r)\right]_b^a;\quad(19)$$

$$\int_b^a(r^2-a^2)G_1(\xi_i r)dr=$$

$$=\frac{1}{\xi_i^2}\left[2rG_1(\xi_i r)-\xi_i(r^2-a^2)G_0(\xi_i r)\right]_b^a.\quad(20)$$

Умножаем (19) на $G_1(\xi_i a)$, а (20) — на $J_1(\xi_i a)$ и вычитаем одно из другого, тогда получим:

$$\int_b^a(r^2-a^2)L_1(\xi_i r)dr=$$

$$=-\frac{b^2-a^2}{\xi_i}\left[J_0(\xi_i b)G_1(\xi_i a)-G_0(\xi_i b)J_1(\xi_i a)\right].$$

Теперь воспользуемся рекуррентными соотношениями

$$J_0(\xi_i b)=J_1'(\xi_i b)+\frac{1}{\xi_i b}J_1(\xi_i b),$$

$$G_0(\xi_i b)=G_1'(\xi_i b)+\frac{1}{\xi_i b}G_1(\xi_i b)$$

и, учитывая выражение (3) для $\nu = 1$, в конечном итоге получаем искомый образ:

$$H_1\left(\frac{r^2 - a^2}{r}\right) = \frac{a^2 - b^2}{\xi_i^2} L_\nu(\xi_i b)\left[\frac{1}{b} - h\right].$$

Таким образом, нами получено преобразование Ханкеля для смешанной краевой задачи на интервале $0 < b < a$ (см. формулы (1), (3), (5)). Оно позволяет находить решение многих задач нестационарной теплопроводности со смешанными граничными условиями для неограниченных тел с осевой симметрией. В том числе подобные задачи возникают при изучении распределения тепла в производстве изделий из композиционных материалов в авиационной промышленности и космической технике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Арсенин, В.Я.** Методы математической физики и специальные функции [Текст]: учеб. пос. для втузов / В.Я. Арсенин.— Изд. 2-е, перераб. и доп.— М.: Наука, 1984.— 384 с.

2. **Снеддон, И.** Преобразование Фурье [Текст] / И. Снеддон; пер. с англ. А.Н. Матвеева; под ред. Ю.Л. Рабиновича.— М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1955.— 688 с.

3. **Кошляков, Н.С.** Уравнения в частных производных математической физики [Текст]: учеб. пос. для мех.-мат. фак. ун-тов / Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов.– М.: Высш. шк., 1970.— 712 с.

4. **Ватсон, Г.Н.** Теория бесселевых функций [Текст]: В 2 ч. Ч. 1. / Г.Н. Ватсон; пер. с англ. В.С. Бермана.— М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1949.— 799 с.

5. **Диткин, В.А.** Интегральные преобразования и операционное исчисление [Текст] / В.А. Диткин, А.П. Прудников.— М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1961.— 523 с.

6. **Эккерт, Э.Р.** Теория тепло- и массопереноса [Текст] / Э.Р. Эккерт, Р.М. Дрейк; пер. с англ. под ред. А.Н. Лыкова.— М.-Л.: Госэнергоиздат, 1961.— 682 с.

7. **Лыков, А.В.** Теория теплопроводности [Текст]: учеб. пос. для вузов / А.В. Лыков.— М.: Высш. шк., 1967.— 600 с.

8. **Положий, Г.Н.** Уравнения математической физики [Текст]: учеб. пос. для вузов / Г.Н. Положий.— М.: Высш. шк., 1964— 560 с.

9. **Толстов, Г.П.** Ряды Фурье [Текст] / Г.П. Толстов.— М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1960.— 392 с.

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

УДК 539.8

Ю.Ф. Иванов, С.А. Невский,
С.В. Коновалов, В.Е. Громов

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ПРОЦЕСС ПЕРЕСТРОЙКИ ДИСЛОКАЦИОННЫХ СУБСТРУКТУР АЛЮМИНИЯ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ

Для изучения пластических и прочностных свойств металлов помимо активной деформации и ползучести применяется метод релаксации напряжений. Исследование процесса указанной релаксации представляет не только научный, но и практический интерес. В условиях релаксации напряжений работают все напряженные механические соединения и упругонапряженные детали, а в ряде случаев при расчете деталей машин на прочность критерии релаксации становятся решающими [1]. В этой связи актуальной проблемой физического материаловедения является разработка способов управления релаксацией напряжений. Одним из таких способов могут оказаться внешние энергетические воздействия. Известно, что внешние электрические воздействия существенно изменяют структуру и фазовый состав металлов и сплавов и, как следствие, их физико-механические свойства. В работах [2 — 6] исследовалось ползучесть металлов при изменении электрического состояния поверхности. Результаты показали, что под действием потенциала увеличивается скорость ползучести и снижается вязкость разрушения, что может быть объяснено изменением характера дислокационной субструктуры. В [6] установлено, что при изменении электрического потенциала снижается объемная доля хаотической структуры и повышается соответствующая доля сетчатой субструктуры, что свидетельствует о существенной пластификации материала.

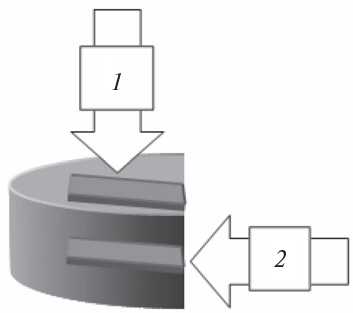


Рис. 1. Места препарирования тонких фольг на образце:
1 — поверхностный слой,
2 — расположенный на глубине 7,5 мм

Цель настоящей работы — анализ изменений параметров дефектной субструктуры алюминия технической чистоты после релаксации напряжений как в обычных условиях, так и при наложении электрического потенциала. Ранее было установлено, что изменение электрического потенциала поверхности образца увеличивает среднюю скорость релаксации алюминия [7].

Объекты и методика эксперимента

Объектами исследования служили образцы (высота и поперечный размер — 16 и 22 мм соответственно) технически чистого алюминия марки А85. Перед проведением испытаний для снятия внутренних напряжений образцы подвергались рекристаллизационному отжигу при 775 К в течение двух часов. Для экспериментов использовалась автоматизированная установка с программным обеспечением, позволяющим записывать релаксационные кривые при сжатии. При достижении нагрузки 6500 Н и деформации 7 % нагружение прекращалось, и далее регистрировался спад усилия во времени. Статистическая обработка проводилась по 10 образцам, испытанным как в обычных условиях, так и при наложении потен-

циалов 0,5 и 1,0 В. Подведение электрического потенциала осуществлялось от стабилизированного источника питания. Для исключения протекания тока образец и сама испытательная машина изолировались от земли. Во всех случаях температура испытаний составляла 296 К. Исследование дефектной субструктуры осуществляли методами дифракционной электронной микроскопии тонких фольг (прибор ЭМ-125) [8–12]. Фольги готовили из двух слоев (рис. 1): включающего поверхность образца (*1*) и расположенного в его центре (*2*).

В процессе исследования анализировались изменения следующих величин: η — плотности изгибных экстинкционных контуров, σ — амплитуды полей внутренних дальнодействующих напряжений и P_V —объемных долей типов дислокационных субструктур. Величины определялись по методикам, приведенным в работах [8 — 12].

Результаты исследований и их обсуждение

Типичные кривые релаксации напряжений представлены на рис. 2.

Видно, что при наложении электрического потенциала скорость и глубина релаксации увеличивается; это должно отразиться на дефектной субструктуре материала.

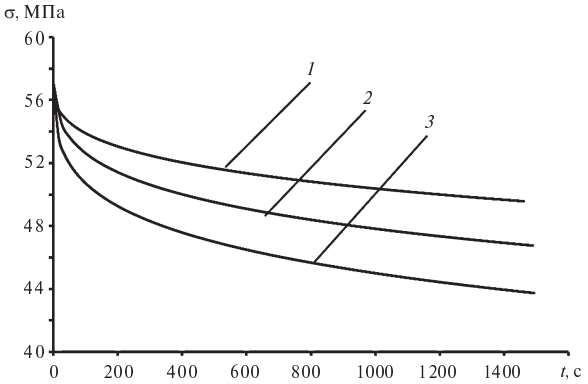


Рис. 2. Типичные кривые релаксации напряжений в алюминии при различных значениях потенциала φ, В: 0 (*1*), 0,5 (*2*), 1 (*3*)

Выполненные исследования показали, что независимо от схемы проведения испытаний и места расположения анализируемой фольги (поверхность или центр образца) в исследуемом материале выявлены три типа дислокационных субструктур: хаотическая, сетчатая и дислокационные петли. Кроме того, в центральной зоне образца присутствуют оборванные субграницы, а также полосовая субструктура с неравно- и равноосными фрагментами (рис. 3). Как правило, структура дислокационного хаоса рас-

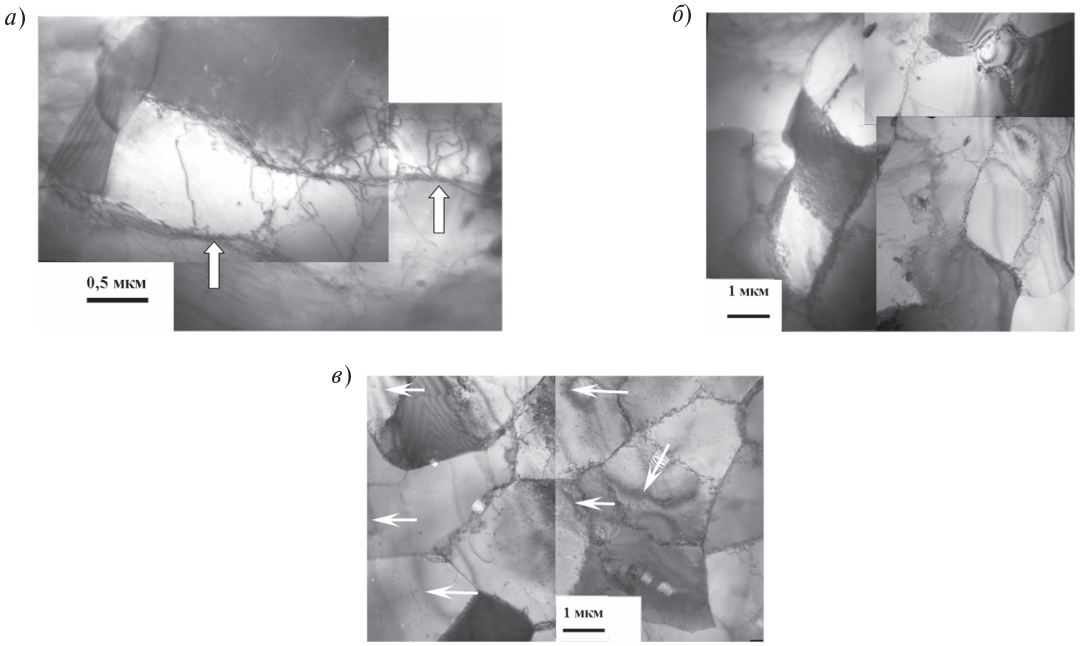


Рис. 3 Микрофотографии центральной зоны образцов алюминия после испытаний на релаксацию напряжений. Выявлены дислокационные субструктуры: *а* — оборванные субграницы; *б* и *в* — полосовая с неравноосными и равноосными фрагментами, соответственно

пределена равномерно по объему зерна, а сетчатая субструктура расположена преимущественно у границ или стыков границ зерен. Формирующиеся субграницы наряду с границами зерен служат источниками внутренних полей напряжений материала, которые выявляются при электронно-микроскопическом исследовании тонких фольг по наличию изгибных экстинкционных контуров (см. рис. 3, *в*).

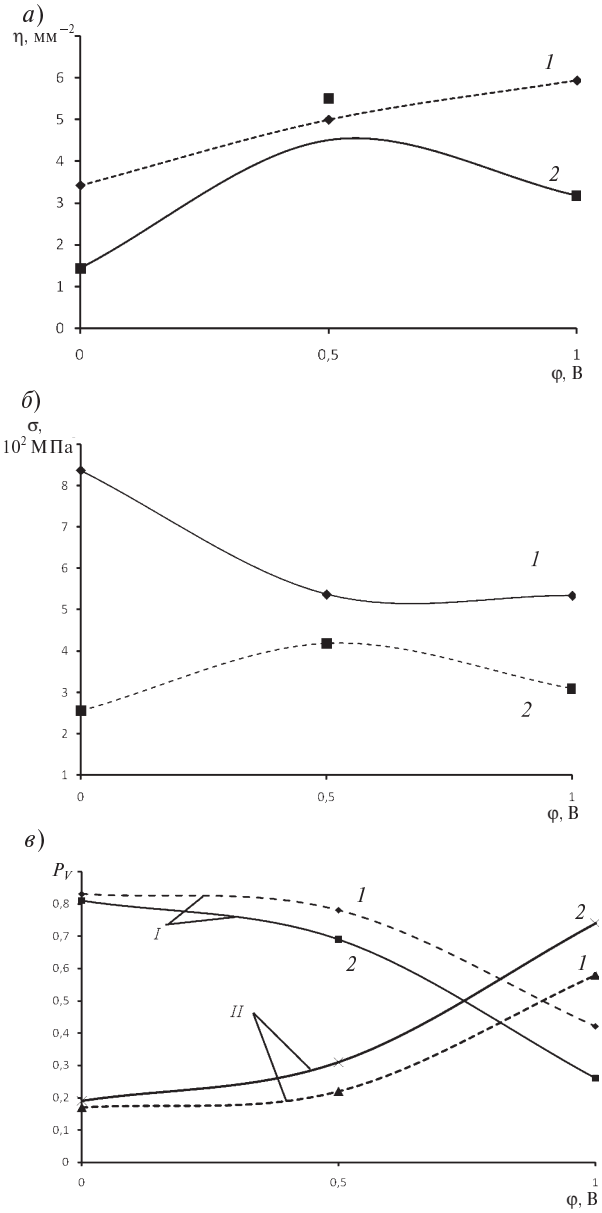


Рис. 4. Зависимости параметров дислокационной субструктуры (*а*—*в*) от приложенного потенциала для разных мест препарирования образцов фольги:
1 — на глубине 7,5 мм; *2* — на поверхности.
I, *II* — средняя объемная доля полосовой субструктуры и равноосных фрагментов, соответственно

Количественный анализ параметров дефектной субструктуры алюминия, подвергнутого испытанию на релаксацию напряжений без потенциала и в условиях приложенного потенциала, позволил выявить роль величины потенциала в деформации материала. Прежде всего, отметим существенную неоднородность протекания процесса деформации, т. е. зависимость состояния структуры материала от места расположения анализируемой фольги (в объеме образца или в его поверхностном слое). В центральной части материала идет монотонное увеличение плотности η изгибных экстинкционных контуров, тогда как в поверхностном слое характер зависимости указанной плотности от величины потенциала — немонотонный (рис. 4, *а*). Такое увеличение плотности контуров означает, что центральная зона образца находится в более упруго-напряженном состоянии, чем поверхность. Оценка амплитуды полей внутренних напряжений показала, что при обычных условиях в центре образца эта амплитуда в 3,3 раза больше, чем в поверхностном слое. С ростом электрического потенциала наблюдается спад напряжений в центральной зоне образца, тогда как в поверхностном слое эта зависимость немонотонна (рис. 4, *б*). Такие изменения полей напряжений говорят о перестройке дислокационной подсистемы, что проявляется в уменьшении средней объемной доли полосовой субструктуры и увеличении доли равноосных фрагментов (рис. 4, *в*).

При перестройке дислокационных субструктур происходит снижение напряжений вследствие как перекрытия полей напряжений при перегруппировке дислокаций [13], так и их аннигиляции. Возможно, что в наших условиях эти процессы являются сопутствующими. С одной стороны, происходит увеличение плотности изгибных экстинкционных контуров, но снижается амплитуда внутренних полей напряжений; с другой — рост объемной доли равноосных фрагментов показывает, что при переходе от полосовой субструктуры происходит снижение плотности дислокации вследствие их аннигиляции [14]. По-видимому, изменение электрического потенциала стимулирует эти процессы, что проявляется в увеличении скорости и глубины релакса-

ции (см. рис. 2). Перекрытие полей внутренних напряжений будет доминировать в центральных областях материала, что показывает рост значений плотности η и снижение амплитуды σ с увеличением потенциала φ. В поверхностном слое материала, по-видимому, преобладает аннигиляция дислокаций, что подтверждается более высокой (по сравнению с центральной областью) скоростью роста объемной доли равноосных фрагментов.

Сформулируем основные выводы, сделанные на основании проведенных исследований.

1. Приложение электрического потенциала приводит к снижению внутренних полей напряжений в центральной зоне образца. В поверхностном слое наблюдается немонотонная зависимость амплитуды дальнодействующих напряжений от величины потенциала.

2. Объемная доля полосовой субструктуры снижается, а объемная доля равноосных фрагментов повышается вне зависимости от места выбора фольги при изменении потенциала; это, по-видимому, способствует стимулированию процесса релаксации напряжений.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 г.г.» (гос. контракт № П411) и РФФИ (проект 10-07-00172-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Борздыка, А.М.** Релаксация напряжений в металлах и сплавах [Текст] / А.М. Борздыка, Л.Б. Гецов.— М.: Наука, 1978.— 256 с.

2. **Клыпин, А.А.** Влияние контакта разнородных металлов на ползучесть меди и алюминия [Текст] / А.А. Клыпин, А.А. Лучина // Известия АН СССР.— 1985.— № 2.— С. 138–146.

3. **Коновалов, С.В.** О влиянии электрического потенциала на скорость ползучести алюминия [Текст] / С. В. Коновалов, В.И. Данилов, Л.Б. Зуев [и др.] // ФТТ.— 2007.— Т. 49.— Вып. 8.— С. 1389–1391.

4. **Иванов, Ю.Ф.** Влияние электрического потенциала на поверхность разрушения алюминия при ползучести [Текст] / Ю.Ф. Иванов, С.В. Коновалов, О.А. Столбоушкина [и др.] // Вестник ЮУрГУ.— 2009.— № 22.— Вып. 1.— С. 66–71.

5. **Коновалов, С.В.** Роль электрического потенциала в ускорении ползучести и формировании поверхности разрушения Al [Текст] / С.В. Коновалов, О.А. Столбоушкина, Ю.Ф. Иванов [и др.] // Известия РАН. Серия физическая.— 2009.— Т. 73.— № 9.— С. 1315–1318.

6. **Gromov, V.E.** Dislocation substructure evolution on Al creep under the action of the weak electric potential [Text] / V.E. Gromov, Yu.F. Ivanov, S.V. Konovalov [et al.] // Material Science and Engineering. A.— 2010.– Vol. 527.— № 3.— P. 858–861.

7. **Невский, С.А.** Влияние слабых электрических потенциалов на процесс релаксации напряжений в алюминии [Текст] / С.А. Невский, С.В. Коновалов, С.В. Воробьев [и др.] // Вестник Адыгейского университета.— 2010.— Вып.1.— С. 90–95.

8. **Хирш, П.** Электронная микроскопия тонких кристаллов [Текст] / П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон [и др.]— М.: Мир, 1968— 576 с.

9. **Громов, В.Е.** Физика и механика волочения и объемной штамповки [Текст] / В.Е. Громов, Э.В. Козлов, В.И. Базайкин [и др.]— М.: Недра, 1997— 296 с.

10. **Конева, Н.А.** Дальнодействующие поля напряжений, кривизна-кручение кристаллической решетки и стадии пластической деформации. Методы измерений и результаты [Текст] : сб. науч. тр. / Н.А. Конева, Э.В. Козлов, Д.В. Лычагин [и др.] // Новые методы в физике и механике деформируемого твердого тела.— Томск: ТГУ, 1990.— С. 83–93.

11. **Конева, Н.А.** Природа субструктурного упрочнения [Текст] / Н.А. Конева, Э.В. Козлов // Изв. Вузов. Физика.— 1982.— № 8— С. 3–14.

12. **Конева, Н.А.** Эволюция дислокационной субструктуры и стадии пластического течения поликристаллического железо-никелевого сплава / Н.А. Конева, Э.В. Козлов, Д.В. Лычагин [и др.] // ФММ.— 1985.— Т. 60.— № 1.— С. 171— 179.

13. **Фарбер, В.М.** Классификация процессов релаксации напряжений и их проявление при пластической деформации металлов [Текст] / В.М. Фарбер, О.В. Селиванова // Металлы.— 2001.— № 1.— С. 110— 115.

14. **Конева, Н.А.** Физическая природа стадийности пластической деформации [Текст] / Н.А. Конева, Э.В. Козлов // Изв. Вузов. Физика.— 1990.— № 2— С. 89–106.

УДК: 34.49.29, 61:539.1.074, 53.088

М.В. Елизарова, В.О. Миронов

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ СГЛАЖИВАНИЯ ДОЗИМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПРИ ИНСТАЛЛЯЦИИ СИСТЕМ ПЛАНИРОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ

Оценка погрешности сглаживания дозиметрических данных является неотъемлемым этапом при вводе в эксплуатацию систем планирования дистанционной лучевой терапии, обеспечивающей расчет дозных распределений индивидуально для каждого пациента в процессе предлучевой подготовки. Создание плана облучения и расчет дозных распределений производится на основе данных компьютерной томографии и характеристик терапевтических пучков посредством специализированного программного обеспечения системы планирования, позволяющего физику-медику выбирать форму полей, количество и ориентацию терапевтических пучков, а также оптимизировать лечебный план для достижения основной цели лучевой терапии — подведения тумороцидной дозы к биологической мишени при минимизации лучевых повреждений окружающих здоровых тканей.

Лучевая терапия представляет собой сложный процесс, точность реализации каждого из этапов которого потенциально может оказать влияние на контроль над опухолью и/или риск возникновения осложнений. Требования к точности в радиотерапии должны базироваться на анализе источников погрешностей и условий, которые реально достижимы в клиническом процессе.

Погрешности в радиационной терапии можно разделить на две основные группы: полученные при измерении дозы (неоднородность) и неточности в построении геометрии «пациент — пучок» (пространственные). Последние можно подразделить на механические, связанные с работой оборудования (симулятора, лечебного аппарата, позиционирующих систем), и терапевтические, связанные с конституциональными особенностями пациента. Диапазон погрешностей, связанных с данными особенностями, зависит от методики и качества лечения, от общего состояния пациента (возраст, вес, подвижность и т. п.).

При рассмотрении точности подведения дозы в лучевой терапии необходимо учитывать характер ошибок — случайные или систематические. Систематические ошибки, к которым относятся ошибки дозиметрии и погрешности обработки данных при дозиметрической подготовке системы планирования, представляют собой более серьезную проблему и требуют особого рассмотрения, поскольку они в дальнейшем закладываются в расчеты доз для всех последующих лечебных планов.

Для конвенциальной дистанционной лучевой терапии обоснованные требования дозиметрической и пространственной точности определены в 5 % и 5 мм, соответственно. Для этих исходных величин погрешность расчета дозного распределения не должна превышать 3 % для плана в целом. Необходимо отметить, что клинически значимыми являются не только значения поглощенной дозы в области открытого поля, но и в областях тени и полутени, что требует комплексного подхода к анализу рассчитываемых и получаемых экспериментально дозных распределений.

Таким образом, цель данной работы — комплексная оценка погрешности обработки дозиметрических данных на этапе их установки в систему планирования дистанционной лучевой терапии. Работа проводилась на базе ГУЗ «Санкт-Петербургский клинический научно-практический центр специализированных видов медицинской помощи (онкологический)» при вводе в эксплуатацию компьютерной системы планирования дистанционной лучевой терапии «XiO». Анализ дозиметрических данных, полученных на клинических пучках медицинского линейного ускорителя электронов Mevatron PRIMUS, проводился по методике, разработанной на основе рекомендаций, изложенных в публикациях [1–4].

Экспериментальная методика и анализ дозиметрических данных

Процесс ввода в эксплуатацию системы планирования дистанционной лучевой терапии начинается со сбора дозиметрических данных. Для терапевтических тормозных фотонных пучков проводится измерение следующих параметров: абсолютные значения поглощенной дозы на центральной оси пучка, продольные и диагональные профили дозного распределения для стандартизованного набора размеров полей и глубин, глубинные распределения поглощенной дозы. Также определяются коэффициенты рассеяния фантома и многолепесткового коллиматора, коэффициенты ослабления для клиновидных фильтров, блоков, подставок для блоков, коэффициенты ткань — фантом и ткань — воздух.

Для данных измерений применялись: система для проведения абсолютной и относительной дозиметрии «Blue Phantom» с механизмом трехмерного сканирования, ионизационные камеры фармеровского типа FC65-P, FC65-G, наперстковые ионизационные камеры CC13, клинический дозиметр «DOSE-1» Scandintronix Wellhoffer. Абсолютные измерения проводились при размере поля 10×10 см; расстоянии источник — поверхность (РИП) — 90 см; расстоянии источник — детектор (РИД) — 100 см, референсной глубине измерений (D) — 10 см; количестве отпускаемых мониторных единиц (МЕ) — 100.

Схема измерений относительных дозных распределений приведена на рис. 1 [5], где D — глубина в воде, на которой расположен детектор. Положение водного фантома относительно центральной оси пучка и системы координат ускорителя корректировалось при помощи лазерной системы позиционирования Gamex. Контроль расстояний РИП и РИД осуществлялся при помощи оптического дистанциометра, встроенного в поворотную платформу ускорителя. При проведении измерений, наряду с полевой камерой (поз. *4*, рис. 1), с помощью которой измерялась подводимая доза, использовалась референсная камера (поз. *3*) для учета случайных флуктуаций терапевтического пучка тормозных фотонов.

На рис. 2 и 3 представлены примеры глубинных дозных распределений для полей различных размеров пучка с энергией 6 МэВ и семейства нормированных профилей для этого же пучка для различных глубин открытого поля 10×10см и для случая пучка, модифицированного клиновидным фильтром 15°.

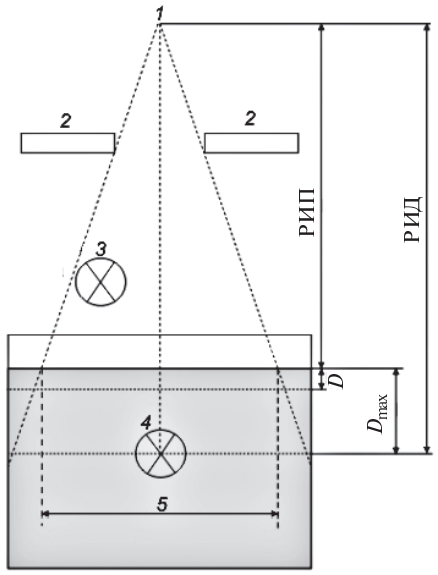


Рис. 1. Схема измерений относительных дозных распределений: *1* — источник, *2* — створки коллиматора, *3*, *4* — референсная и полевая камеры, *5* — размер поля; обозначения: РИП, РИД — расстояния источник — поверхность и источник — детектор; D_{max} — глубина максимума ионизации, D — референсная глубина измерений

На этапе проведения дозиметрических измерений геометрические погрешности могут быть обусловлены отклонением в позиционировании ионизационной камеры в пределах ± 0,5 мм,

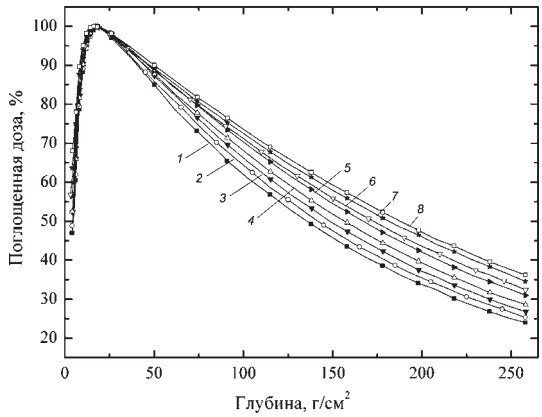


Рис. 2. Экспериментальные глубинные дозные распределения для клинического фотонного пучка с энергией 6 МэВ при размерах полей, см: 3×3 (*1*), 5×5 (*2*), 7×7 (*3*), 10×10 (*4*), 15×15 (*5*), 20×20 (*6*), 30×30 (*7*), 40×40 (*8*)

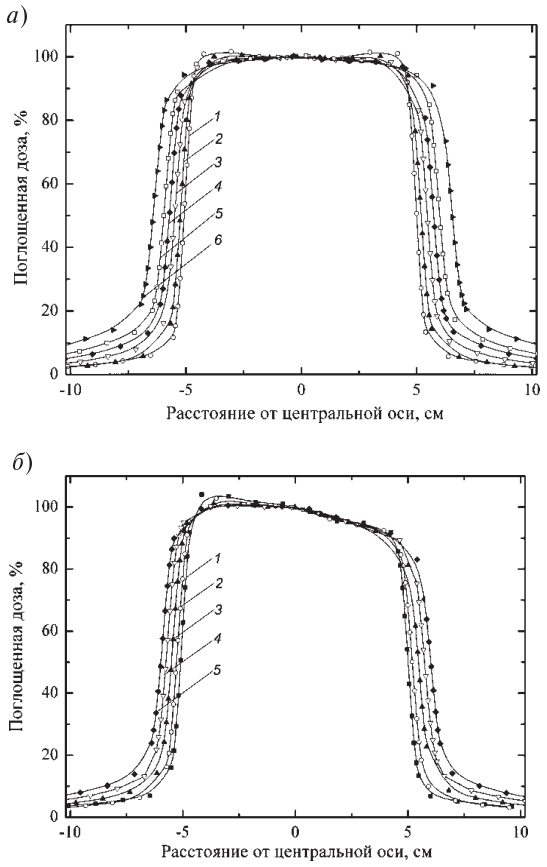


Рис. 3. Семейство нормированных экспериментальных профилей для клинического фотонного пучка с энергией 6 МэВ при размере поля 10×10 см: *а* — открытое поле; *б* — модифицированное клиновидным фильтром 15°.

Глубина, г/см^2: 1,2 (*1*); 5,0 (*2*); 10 (*3*); 15 (*4*); 20 (*5*); 30 (*6*)

а также погрешностью позиционирования водного фантома относительно координатной системы ускорителя. Кроме того, на данном этапе могут играть роль флуктуации первичного электронного пучка, нестабильность параметров генератора излучения, шумов электронных схем аппаратуры и др. [6].

Перед инсталляцией дозиметрических данных в систему планирования лучевой терапии данные подвергаются обработке, включающей сглаживание кривых с целью удаления флуктуаций, симметризацию профилей путем удаления одного плеча распределения и замены его на зеркальное отражение одной из половин, а также параметризацию кривых с созданием модели терапевтического пучка. Работа алгоритмов, осуществляющих расчет дозных распределений в системе планирования, оценивалась на основе смоделированных распределений поглощенной дозы в воде. Обработка и параметризация дозиметрических данных показала отклонения полученных кривых дозных распределений, устанавливаемых в систему планирования, от исходных экспериментальных распределений.

Параметры, характеризующие погрешность построения продольных профилей и глубинных распределений поглощенной дозы для фотонных пучков, представлены на рис. 4.

Рекомендуемые значения указанных выше параметров для тормозных фотонных пучков приведены в таблице [1].

Результаты и обсуждение

Сглаживание дозных кривых производилось с применением одного из следующих математических методов:

наименьших квадратов;

медианного;

скользящего среднего арифметического;

скользящего среднего геометрического;

огибающих;

аппроксимации кривой Безье.

Последующий анализ был проведен для каждого из пяти параметров посредством шести методов сглаживания.

На рис. 5, *а* представлена зависимость от размера поля параметра δ_1, характеризующего расхождение экспериментальной и сглаженной кривых в клинически наиболее значимой области — на референсной глубине. Для каждого из использованных методов сглаживания вносимая погрешность не достигала 0,2 %, однако для метода среднего геометрического погрешность превышала таковую для метода наименьших квадратов примерно в два раза. Погрешность, вносимая при моделировании данных, не зависела от размера поля для любого из использованных методов, что обусловлено характером нормирования клинических пучков.

Зависимость от размера поля параметра δ_2, характеризующего расхождение экспериментальной и сглаженной кривых в области накопления, представлена на рис. 5, *б*.

Необходимо отметить, что данная область дозного распределения трудно параметризуема и практически не используется при модельном описании клинических пучков тормозных фотонов. Тем не менее, наименьшее отклонение

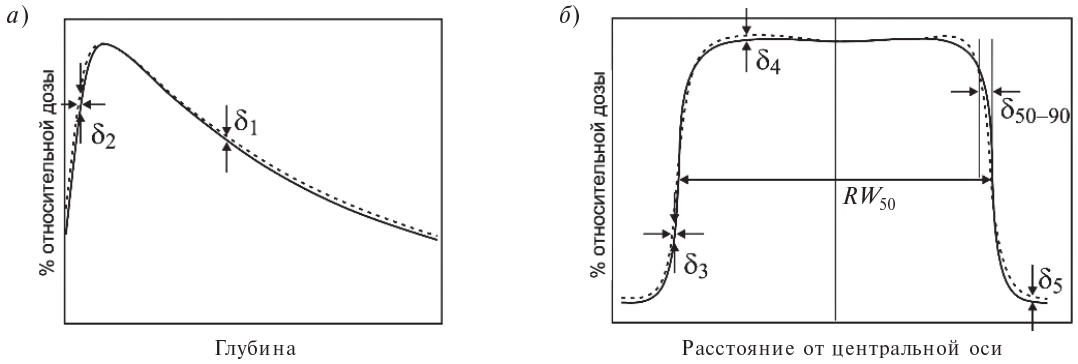


Рис. 4. Графическое представление параметров, характеризующих погрешности при построении глубинных распределений (*а*) и продольных профилей (*б*) поглощенной дозы для фотонных пучков (см. рис. 2, 3)

сглаженных кривых от экспериментальных наблюдалось при использовании методов наименьших квадратов и медианного, тогда как все остальные методы сглаживания приводили к внесению погрешности свыше 1 %.

На рис. 5, *в* представлена зависимость от глубины погрешности δ_3 (характеризует расхождение в нижней части области высокого дозного градиента), вносимой при сглаживании экспериментальных профилей шестью указанными методами. Методы наименьших квадратов, медианный, среднего геометрического и аппроксимации кривой Безье позволяли сохранить погрешность при сглаживании в пределах 0,5 %, причем значение параметра δ_3 для перечисленных методов оставалось практически неизменным при изменении глубины.

На рис. 5, *г* представлена зависимость от глубины параметра δ_4, характеризующего расхождение экспериментальной и сглаженной кривых в области плеча профиля. Все методы позволяли сохранить погрешность при сглаживании в пределах 0,5 %, причем погрешность практически линейно возрастала с увеличением глубины. Геометрическое искажение формы плеча профиля при переходе к большим глубинам связано с неравномерной жесткостью клинического пучка излучения вследствие влияния конусного фильтра ускорителя. Появление перегиба на экспериментальной кривой, в свою очередь, приводит к увеличению погрешности при сглаживании, что должно приниматься во внимание при подготовке дозиметрических данных, так как параметр δ_4 характеризует клинически значимую область открытого поля.

На рис. 5, *д* представлена зависимость параметра δ_5 (расхождение в области порога профиля) от глубины. Погрешность при сглаживании посредством всех рассмотренных методов остается в пределах 0,5 % и линейно возрастает с увеличением глубины. Это обусловлено смещением области перегиба между порогом профиля и об-

Рекомендуемые значения параметров погрешности для тормозных фотонных пучков

Параметр	Геометрия поля		
	Прямоугольное	Прямоугольное с модификатором	Фигурное
δ_1, %	±2	±3	±4
δ_2, %	10	15	15
δ_3, %	10	15	15
δ_4, %	±3	±3	±4
δ_5, %	±1	±1	±1
δ_{50-90}, мм	2	3	3

Примечание. Графическое представление параметров дано на рис. 4.

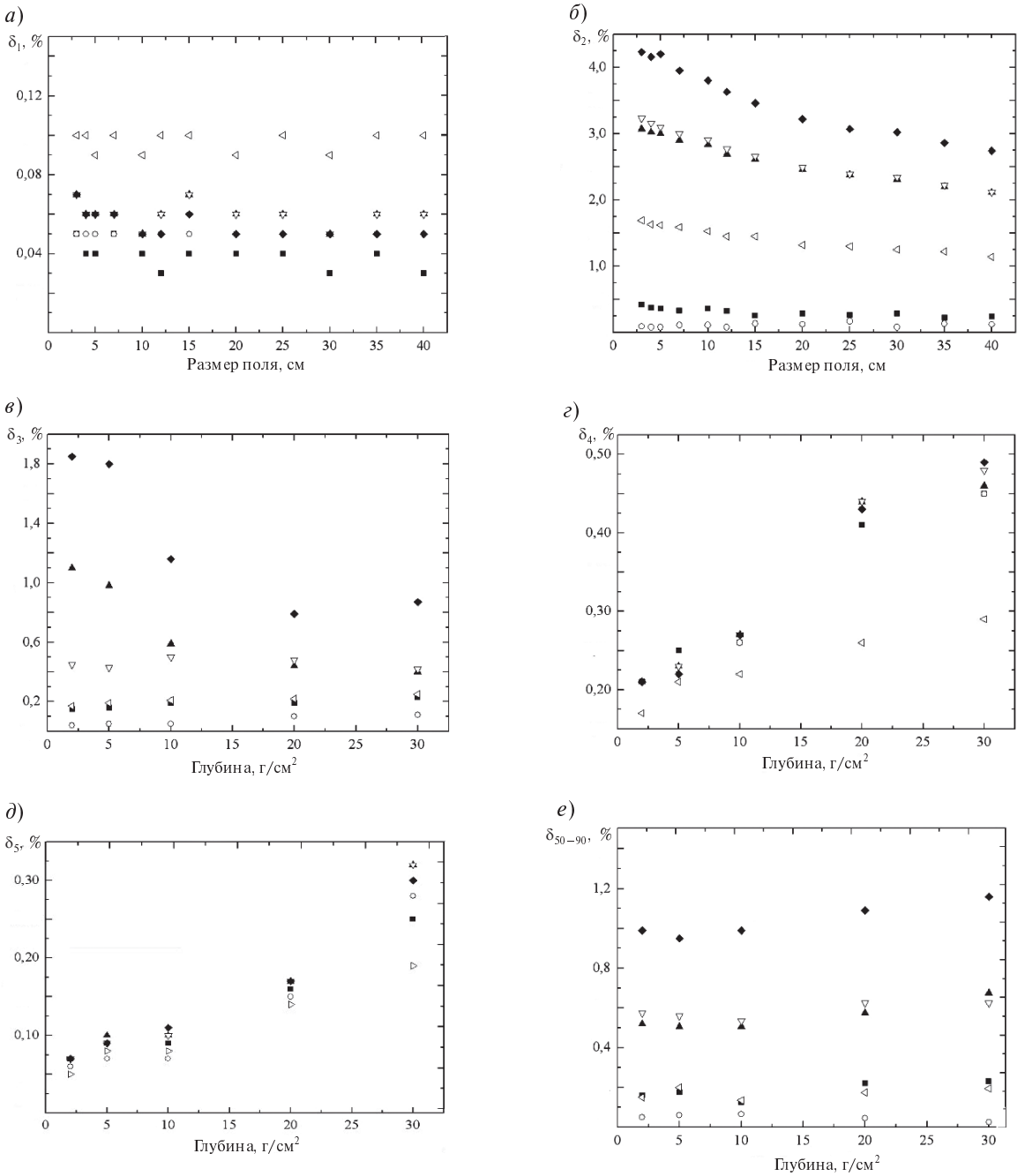


Рис. 5. Зависимость погрешностей δ_1–δ_{50-90}, вносимых при сглаживании экспериментальных дозных распределений, от размера поля (*а*, *б*) и глубины (*в*—*е*).

Использованы методы сглаживания: наименьших квадратов (■); медианный (○); скользящего среднего арифметического (▲); скользящего среднего геометрического (▽); огибающей (♦); аппроксимации кривой Безье (◁)

ластью высокого дозного градиента в область более высоких доз (от 10 % величины дозного максимума на глубине 1,2 г/см^2 до 20 % от этой величины на глубине 30 г/см^2) вследствие растущего с глубиной вклада рассеянного излучения.

Зависимость от глубины параметра δ_{50-90}, характеризующего расхождение сглаженной и экспериментальной кривых в верхней части области высокого дозного градиента на границе поля, представлена на рис. 5, *е*. Использование любого из перечисленных методов (за исключением метода огибающей) позволяло сохранить значение параметра δ_{50-90} в пределах 1 %, причем лучшие результаты были получены при сглаживании экспериментальных кривых методом наименьших квадратов, медианным методом и методом аппроксимации кривой Безье.

Необходимо отметить, что клиническая значимость параметров δ_{50-90}, δ_3 и δ_5, характеризующих точность сглаживания в области полутени, возрастает с переходом к технологиям конформного облучения, в рамках которых предполагается повышение дозы, подводимой к биологической мишени, наряду с экранированием критических структур, которые реализуются с высокой степенью геометрической точности.

Таким образом, на примере анализа результатов сглаживания для клинического пучка тормозных фотонов с энергией 6 МэВ нами показано, что адекватный выбор метода сглаживания позволяет провести подготовку дозиметрических данных с погрешностью, не превышающей 1 % от значения поглощенной дозы на центральной оси пучка. Наибольшую погрешность продемонстрировал метод среднего от огибающих. Наилучшим образом экспериментальные данные представляются методом наименьших квадратов, который и можно рекомендовать для процедуры сглаживания в процессе подготовки кривых дозных распределений при установке в систему планирования дистанционной лучевой терапии.

Учет погрешностей, возникающих на каждом из этапов дозиметрической подготовки компьютерной системы планирования дистанционной лучевой терапии, таких как сбор дозиметрических данных, сглаживание, параметризация и расчет дозы одним из клинических алгоритмов, позволяет оценить наличие систематических ошибок, закладываемых в расчет дозы облучения. Подобный анализ должен входить в комплекс мер по обеспечению адекватности подводимой дозы при планировании и реализации дистанционной лучевой терапии онкологических заболеваний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Commissioning and quality assurance of computerized planning systems for radiation treatment of cancer [Text]: Technical Report Series № 430. Vienna: IAEA, 2004.— 281 p.

2. Specification and Acceptance Testing of Radiotherapy Treatment Planning Systems [Text] // Vienna, IAEA,— 2007.— 61 p.

3. **Camargo, P.R.T.L.** Implementation of a quality assurance program for computerized treatment planning systems [Text] / P.R.T.L. Camargo, L.N. Rodrigues L. Furnaru [et al.] // Med. Phys.— 2007.— Vol. 34.— No 7.— P. 2827–2836.

4. **Тарасов, Г.П.** Статистические методы обработки информации в системах измерения ионизирующего излучения [Текст] / Г.П. Тарасов.— М.: Атомиздат, 1980.— 169 с.

5. Absorbed dose determination in external dose radiotherapy. An international code of practice for dosimetry based on standards o9f absorbed dose to water [Text].— Vienna: IAEA, 2000.— 229 p.

6. **Hendee, W.R.** Radiation therapy physics [Text] / W.R. Hendee, G.S. Ibbott. — Second ed. — USA, Missuori: Mosby-Year Book Publishers, 1996.— 556 p.

7. **Van Dyk, J.** The modern technology of radiation oncology: A compendium for medical physicists and radiation oncologists [Text]: Vol. 2/ J.Van. Dyk. — USA: Medical Physics Publishing Corp., 2005. 1072 p.

8. Commissioning of radiotherapy treatment planning systems: Testing for typical external beam treatment techniques. Report of the coordinate research project (CRP) on development of procedures for quality assuarance of dosimetry calculations in radiotherapy.— Vienna: IAEA, 2008. — 67 p.

9. **Able, C.M.** Quality assuarance: Fundamental reproducibility tests for 3D treatment-planning systems [Text] / C.M. Able, M.D. Thomas // Journ. of Appl. Clinic. Med. Phys. — 2005.— Vol. 6. — № 3. — P. 13–22.

10. **Mijnheer, B.** Quality assurance of treatment planning systems. Practical examples for non-imrt photon beams [Text] / B. Mijnheer, A. Olszewska, C. Fiorino [et al.].— Belgium, Brussels: ESTRO, 2004.— 96 p.

УДК 523.985.3

Ю.Е. Чариков, Е.М. Склярова

КОНЦЕПЦИЯ ПРИРОДЫ ТЕПЛОВЫХ ВСПЫШЕК НА СОЛНЦЕ

Тепловые вспышки на Солнце — это вспышки, во время которых регистрируется электромагнитное излучение с энергией, не превышающей 20 кэВ, и которые не сопровождаются потоками протонов и высокоэнергичных электронов. Рентгеновский класс тепловых вспышек не превышает С (по классификации GOES — Geostationary Operational Environmental Satellites), то есть мощность излучения не выше 10^{-5} Вт·м$^{-2}$ в диапазоне 1–8 Å. В оптическом диапазоне эти вспышки не бывают яркими, их оптический балл обычно F или N. Однако частота их возникновения, особенно во время периодов низкой активности Солнца, намного выше, чем вспышек с жестким излучением.

Интерес к изучению тепловых вспышек связан, во-первых, с особенностями процесса трансформации энергии магнитного поля в энергию частиц плазмы — в таких вспышках не происходит ускорения заряженных частиц — электронов и протонов до высоких энергий; во-вторых, с тем, что не выяснена роль тепловых вспышек в нагреве верхних слоев атмосферы Солнца; в-третьих, в связи с возможностью проводить диагностику плазмы в области непосредственного энерговыделения, что затруднительно для вспышек с жесткими излучениями, поскольку области энерговыделения и излучения пространственно не совпадают.

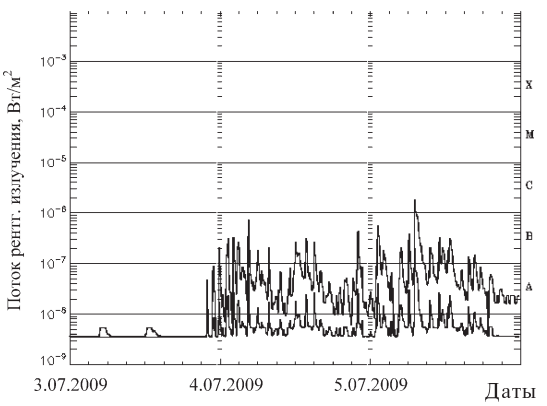


Рис. 1. Поток рентгеновского излучения с 3 по 6 июля 2009 года по данным GOES [1]

Сформулируем основные положения предлагаемой нами концепции природы тепловых вспышек, которые подтвердим в дальнейшем в процессе анализа экспериментальных данных, полученных для вспышки 5 июля 2009 года.

Общая идея хорошо известна: во время вспышки имеет место переход части энергии непотенциального магнитного поля активной области к частицам плазмы. Но в тепловых вспышках ускоренные электроны эффективно изотропизуются в кулоновских столкновениях; при этом устанавливается максвелловское распределение по скоростям (энергиям) на временах порядка секунды. Вследствие этого можно сформулировать основные положения концепции тепловых вспышек.

1. Отсутствие импульсной структуры с характерным временем менее 1 с во временных профилях рентгеновского излучения (до 20 кэВ).

2. Высокие значения концентрации плазмы в источнике — $n_e = 10^{10}$ см$^{-3}$ (эффект испарения частиц не имеет места).

3. Единство областей энерговыделения и ускорения (нагрева), представляющих собой систему низких петель магнитного поля (масштаб высоты не более 5000 км).

4. Охват практически всей (или ее большей части) низкой петли областью излучения.

5. Наличие рентгеновского излучения в результате тормозного излучения тепловой плазмы с максвелловским распределением по энергиям.

6. Ограничение температуры (не более 20 кэВ) и меры эмиссии рентгеновского излучения $EM = n^2 V$ (более 10^{44} см$^{-3}$).

С целью подтверждения концепции рассмотрим характеристики одной из тепловых вспышек.

На рис. 1 представлены результаты измерений потока рентгеновского излучения в двух диапазонах длин волн: 1,0–8,0 и 0,5–4,0 Å спутником GOES [1] с 3 по 6 июля 2009 года.

Вспышечная активность области (Active Region) AR 11024 на Солнце началась 4 июля с резкого возрастания потока в указанных диапазонах энергий. Вспышки классов A и B непрерывно происходили 4 и 5 июля, причем наиболее мощной из них оказалась вспышка 5 июля в 07:05:10 UT (Universal Time — мировое время). Рентгеновский класс вспышки соответствовал C2.7, оптический балл — SF. Фотография этой вспышки в ультрафиолетовом диапазоне (УФ) показана на рис. 2 [2].

В нижней части диска Солнца видна развитая петельная структура в активной области AR 11024 в момент времени, соответствующий максимальному потоку в УФ линии 195 Å, во время вспышки 05.07. 2009 года в 07:13 UT. При детальном рассмотрении (в большем масштабе) в направлении северо-восток — юго-запад в активной области можно выделить систему высоких петель слабого контраста, которые *не уярчаются* во время вспышки, и систему *низких*, ярких петель (см. положение 3), в которой вспышка произошла. Как видно из рисунка, источник УФ-излучения (это горячая плазма) равномерно заполняет практически весь объем системы низких петель (см. положения 3, 4).

Рассмотрим характеристики рентгеновского излучения вспышки. На рис. 3 приведены скорости счета в шести энергетических каналах в диапазоне от 1,7 до 11,8 кэВ, измеренные рентгеновским спектрометром-поляриметром Пингвин-М на спутнике Коронас-Фотон [3].

Временные профили рентгеновского излучения в разных диапазонах энергий представляют собой одиночные импульсы; время роста скорости счета — около 6 мин, фаза максимума составляет примерно минуту и, наконец, спад скорости счета довольно длительный (более 10 мин в каналах с меньшей энергией). При этом в первых трех каналах (1,7–6,7 кэВ) на стадии спада отмечается некоторый избыток излучения в момент времени через 2,5–3 мин после максимума. В более жестком излучении (каналы *4*, *5*) такого избытка не наблюдается.

Для более тщательного анализа временной структуры нами был проведен вэйвлет-анализ временных рядов скоростей счета как для различных энергий, так и для интегрального ряда. Результаты анализа практически подобные, поэтому приведем их только для интегрального по энергиям канала. На рис. 4 представлена спектрограмма интегрального временного ряда скорости счета (нижняя панель), полученная с базисной функцией Гаусса

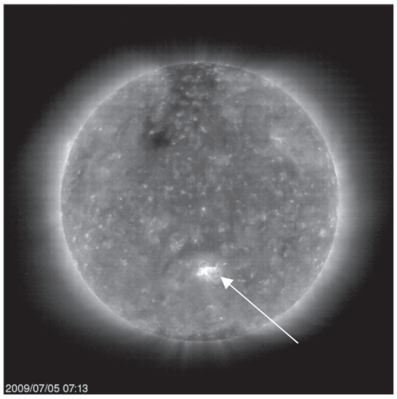


Рис. 2. Снимок поверхности Солнца, сделанный 05.07. 2009 года в УФ линии 195 Å [2]; активная область указана стрелкой

высокого порядка. Видно, что спектрограмма полностью отражает импульсную структуру излучения и не обнаруживает наличия других временных структур или любых периодических компонент. Тестовые примеры для структур, состоящих из отдельных импульсов и квазипериодических структур, наглядно показывают различие вэйвлет-спектрограмм. Вэйвлет-анализ отдельных импульсов обнаруживает на спектрограмме яркие полосы по всем частотам в виде расходящихся секторов (см. рис. 4). Для квазипериодических структур на спектрограмме обнаруживаются ограниченные по частотам замкнутые яркие участки, по форме напоминающие банан.

Таким образом, рентгеновское излучение вспышки представляет собой довольно простую

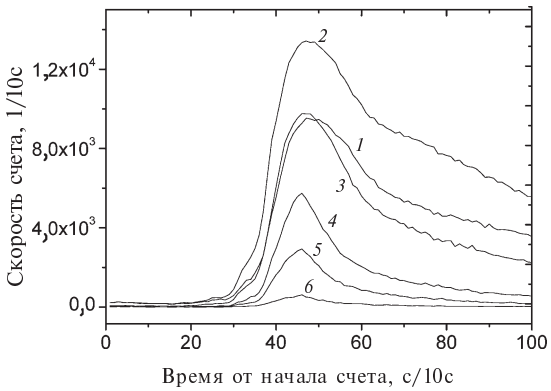


Рис. 3. Временные профили рентгеновского излучения вспышки 05.07. 2009 в разных диапазонах энергий, кэВ: 1,7–3,0 (*1*); 3,0–5,5 (*2*); 5,5–6,7 (*3*); 6,7–8,4 (*4*); 8,4–10,1 (*5*); 10,1–11,8 (*6*). Начало отсчета времени соответствует 07.05 UT

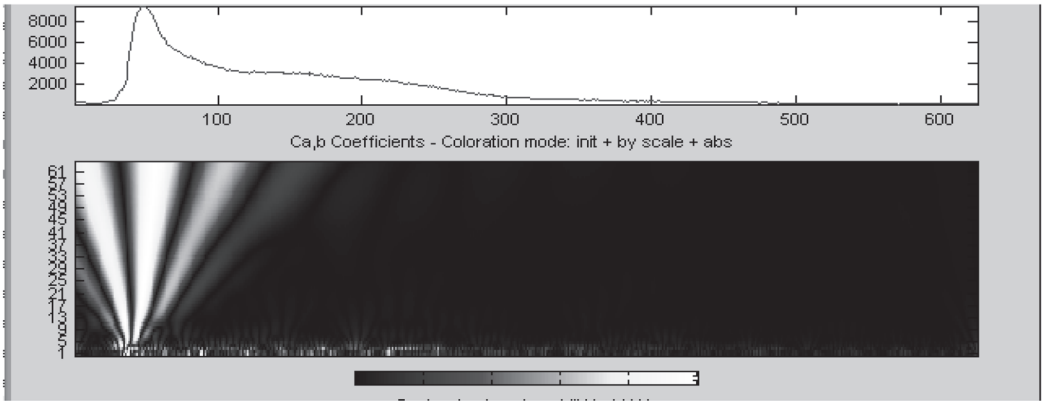


Рис. 4. Временной профиль (верхняя панель, см. также рис. 3) и вэйвлет-спектрограмма (нижняя панель) интегрального временного ряда скорости счета во время вспышки 05.07. 2009

структуру в виде одиночного импульса (см. положение концепции 1). Профили подобного рода скорее соответствуют предположению о квазитепловой природе рентгеновского излучения (см. положение 5), чем нетепловому тормозному излучению. При использовании информации в девяти энергетических каналах можно довольно точно рассчитать температуру плазмы в источнике излучения и меру его эмиссии в предположении о квазитепловой природе (рис. 5).

Анализ результатов расчета позволяет отметить подобие временных профилей рентгеновского потока и температуры плазмы, а также запаздывание меры эмиссии в максимуме примерно на 100 с. Особое внимание привлекает наличие ярко выраженного второго максимума в эволюции меры эмиссии.

На рис. 6 приведена диаграмма температура-мера эмиссии, построенная по данным, представленным на рис. 5. Начальные по времени точки расположены на кривой слева; уменьшение меры эмиссии в самом начале вспышки скорее всего не имеет физического смысла и обусловлено малой статистикой квантов на этом этапе. Увеличение температуры (до максимума) прямо пропорционально росту меры эмиссии, т. е. нагрев плазмы сопровождается увеличением объема источника излучения. После достижения указанного максимума мера эмиссии продолжает расти, достигает максимума, снижается и выходит на второй пик (примерно через 5 мин после первого). Возрастание потока рентгеновского излучения, температуры и особенно меры эмиссии на стадии спада основного импульса после его максимума, скорее всего, связано с возгоранием новой магнитной петли (возможно, и не одной). К сожалению, в нашем распоряжении не имелись УФ изображения вспышки для различных моментов времени, и потому данное предположение не удалось проверить. Оценки температуры вспышечной плазмы дают следующие значения: 0,5 кэВ на начальной стадии, максимальное — 1,7 кэВ; при этом мера эмиссии возрастает от $5\cdot 10^{47}$ до $2{,}7\cdot 10^{48}$ см$^{-3}$ (см. положение 6).

Моделирование источника мягкого рентгеновского излучения в тепловых вспышках

Рассмотрим стадии нагрева и охлаждения плазмы в области источника рентгеновского излучения вспышки. Нагрев связан либо с термализацией ускоренных электронов, либо с тепловыми потоками. Поскольку имеется некоторая неопределенность в источнике нагрева, предположим, что в некоторый момент времени произошел импульсный нагрев плазмы и рассмотрим эволюцию начального теплового импульса. Основными процессами на этом этапе будем считать электронную теплопроводность, которая обеспечивает быстрое перераспределение тепла при высоких температурах [4], и охлаждение плазмы излучением. Будем рассматривать одномерный случай распространения тепла вдоль сильного магнитного поля. Как известно, поперечная (к направлению магнитного поля) теплопроводность меньше в ω_B^2 раз продольной.

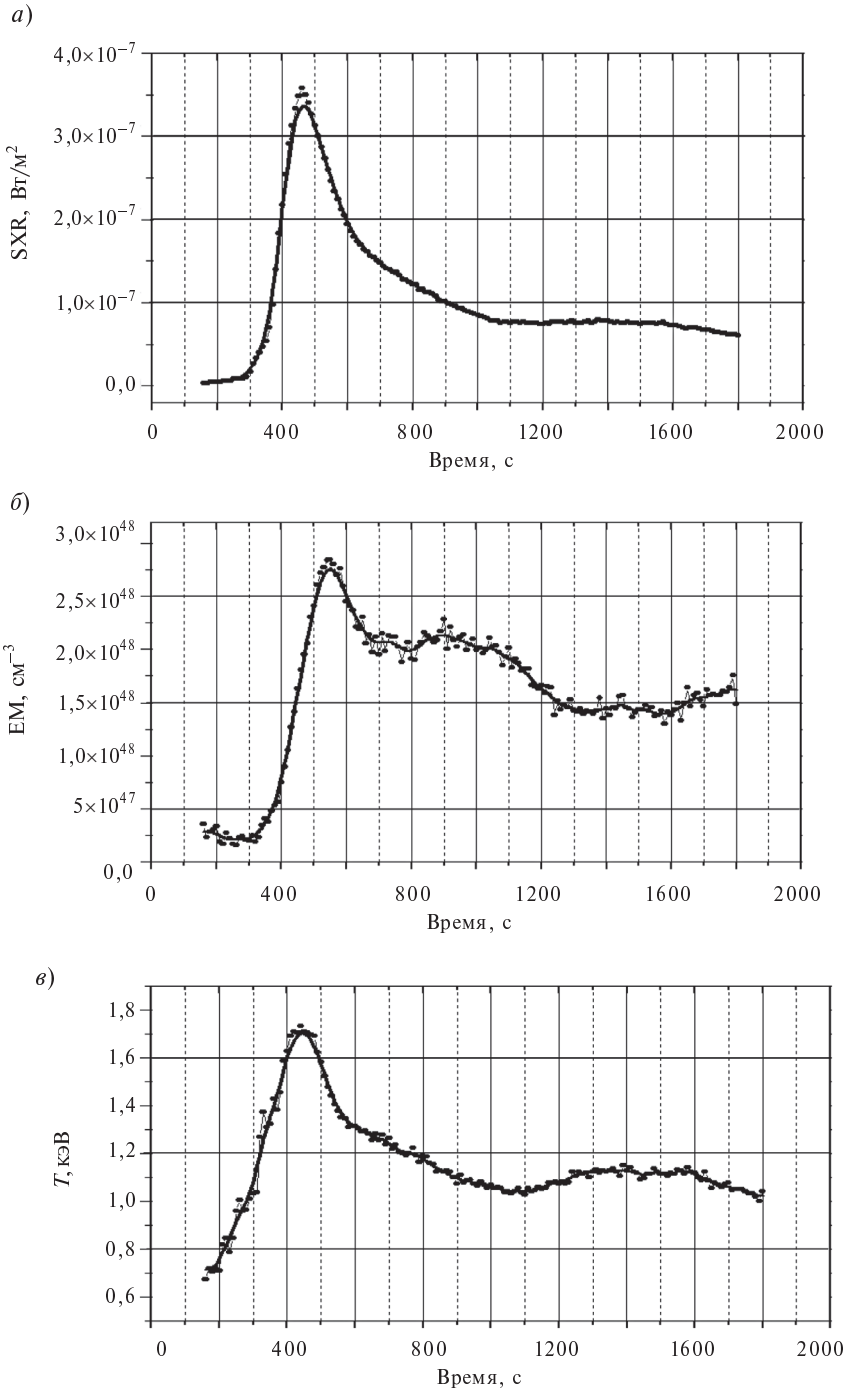


Рис. 5. Результаты обработки данных рентгеновского излучения вспышки 05.07. 2009. Представлены временные профили: *а* — интегральный; *б* —меры эмиссии; *в* — температуры

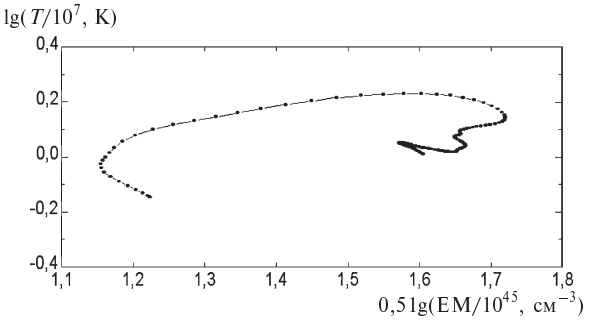


Рис. 6. Диаграмма температура-мера эмиссии вспышки 05.07. 2009, полученная по данным рис. 5, *б*, *в*

Уравнение теплопроводности для рассматриваемого случая имеет вид

$$\frac{d}{dt}\left[3n_e(t)k_{\mathrm{B}}T(s,t)\right]=\frac{d}{ds}\left[kT(s,t)^{5/2}\frac{dT(s,t)}{ds}\right]-$$

$$-n_e(t)^2\Lambda_0 T(s,t)^{-2/3},$$

где t — время, s — пространственная координата вдоль магнитного поля, n_e — концентрация электронов плазмы, $T(s,t)$ — температура, Λ_0 — функция охлаждения, k_{B} — постоянная Больцмана, k — коэффициент электронной теплопроводности, для которого используется формула [5]

$$k\approx 1{,}84\cdot 10^{-5}\lambda^{-1}T_e^{5/2}$$

(λ — кулоновский логарифм).

В правой части первый член учитывает теплопроводность плазмы, второй — лучистые потери. Концентрацию плазмы считаем постоянной. Как показывают детальные численные расчеты [4], изменение концентрации электронов существенно влияет на профили скорости плазмы и слабо влияет на динамику охлаждения высокотемпературной области. Зависимость функции лучистого охлаждения от температуры была рассчитана в работе [6] и для нашего интервала температур моделировалась экспоненциально-степенной функцией

$$\Lambda=\Lambda_0(T-1)^a\exp\left[-b(T-T_c)\right].$$

Параметры Λ_0, a, b и T_c подгонялись таким образом, чтобы отразить характерные особенности кривой.

Начальное распределение температуры зададим гауссианом с пространственной дисперсией δ и максимальным значением температуры $T_{\max}=10^7$ K:

$$T|_{t=0}=T_{\max}\exp(-s^2/\delta^2)+T_0,$$

где T_0 — равновесное значение температуры плазмы; будем считать также, что поток тепла через границы области отсутствует:

$$\partial T/\partial s=0 \text{ при } s=0 \text{ и } s=s_k.$$

Значение концентрации плазмы принималось $n_e=10^{10}$ см$^{-3}$ и выше, при этом считалось, что $T_{\max}$ уменьшается в e раз примерно за 1 с.

В данной постановке нами не учтены динамические процессы сжатия-расширения плазмы (уравнения непрерывности и движения), но, как показывают численные расчеты других авторов [4], профили температуры в целом не определяются деталями изменения концентрации и гидродинамической скорости плазмы.

Нелинейное уравнение теплопроводности численно интегрировалось методом конечных разностей с итерациями на каждом временном слое. Полученные температурные профили приведены на рис. 7.

Из сравнения диаграмм следует, что определяющую роль в охлаждении плазмы играет процесс теплопроводности и что лучистое охлаждение высокотемпературной области почти не влияет на время релаксации температуры. Однако расчетное время охлаждения существенно меньше наблюдаемого для вспышки 05.07. 2009. По всей видимости, принятая модель нагрева плазмы для стадии нарастания рентгеновского потока не имеет места, нагрев вспышечной плазмы имеет более сложный характер, ускорение и термализация электронов происходят и на стадии охлаждения, но с меньшей интенсивностью. Об этом свидетельствует также избыток рентгеновского излучения на стадии после максимума, правда в наиболее низкоэнергетичных каналах.

В заключение проведем оценки характерных времен теплопроводности t_{cond} и лучистых потерь t_{rad}. Они выражаются как

$$t_{cond}=\frac{21}{5}\frac{\langle n_e\rangle}{kT^{5/2}}k_{\mathrm{B}}L^2;$$

$$t_{rad}=\frac{9k_{\mathrm{B}}T^{5/3}}{5\langle n_e\rangle\Lambda_0},$$

где $2L$ — характерный размер магнитной петли.

Подставляя в эти формулы значения температуры и меры эмиссии, а также времени охлаждения плазмы, принятого за 600 с (см. рис. 5), получим значения концентрации плазмы и ха-

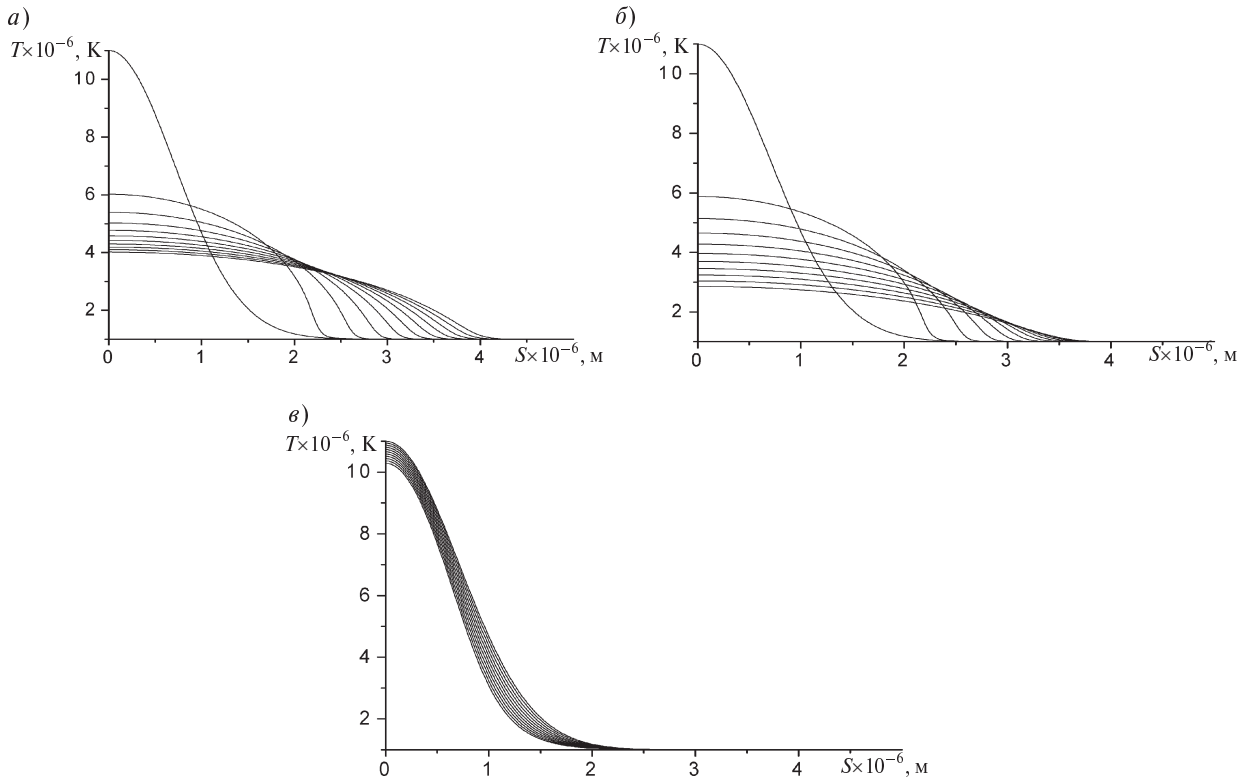


Рис. 7. Влияние различных факторов на эволюцию начального температурного профиля (нижние кривые соответствуют $t = 1$ с): *а* — электронной теплопроводности и функции охлаждения; *б* — только электронной теплопроводности; *в* — только функции охлаждения

рактерного размера области излучения: $n_e = 10^{12}$см$^{-3}$, $L = 10^8$ см.

Эти значения подтверждают наши положения относительно высоты петель и концентрации плазмы в источнике тепловых вспышек.

Таким образом концепция тепловых солнечных вспышек, сформулированная нами в положениях 1 — 7, проверялась в ряде вспышек, измеренных в процессе проведения космических экспериментов на спутнике Коронас-Фотон [3]. Анализ результатов обработки полученных данных, проведение численного моделирования подтверждают практически все положения концепции, что позволяет ее принять. Подобный анализ проводился и для других солнечных вспышек.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Банк данных GOES [Электронный ресурс].— Режим доступа: http://www.swpc.noaa.gov

2. Банк данных TRACE [Электронный ресурс].— Режим доступа: http://msslxr.mssi.ucl.ac.uk

3. **Котов, Ю.Д.** Экспериментальное исследование степени линейной поляризации жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек и спектров мягкого и жесткого рентгеновского излучения Солнца с помощью научной аппаратуры «Пингвин-М» на КА «Коронас-Фотон» [Текст] / Ю.Д. Котов, В.Н. Юров, А.С. Гляненко [и др.] //Астрономический вестник.— 2011.— Т. 45.— № 2.— С. 1–11.

4. **Сомов, Б.В**. Гидродинамика оптически прозрачной плазмы [Текст] / Б.В. Сомов, А.Р. Спектор, С.И. Сыроватский // Вспышечные процессы в плазме. Труды ФИАН им. П.Н. Лебедева АН СССР.— 1979.— Т. 110.— С. 73–94.

5. **Спитцер, Л**. Физика полностью ионизованного газа [Текст] / Л. Спитцер // М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1957.— 316 с.

6. **Raymond, J.C.** Radiative cooling of a low-density plasma [Text]/ J.C. Raymond, D.P. Cox, B.W. Smith // Astrophys. Journal.— 1976.— Vol. 204.— P. 290–292.

УДК 524.1

А.В. Нестеренок, В.О. Найденов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНО-АКТИВНОЙ КОМПОНЕНТЫ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

В результате взаимодействия частиц космических лучей с атмосферой Земли рождаются каскады вторичных частиц и ряд космогенных нуклидов. Для определения скоростей образования последних и интерпретации природных данных из архивов необходимо точное понимание процессов распространения частиц космических лучей и их взаимодействия с атмосферой Земли.

Существует два подхода к проблеме расчета потоков частиц космического излучения в атмосфере. В первом из них потоки и дифференциальные энергетические спектры частиц определяются на основе решения кинетических уравнений для функций распределения [1]. Второй основан на методе статистического моделирования Монте-Карло. Корпускулярный поток для заданного уровня в атмосфере рассчитывается в результате численного моделирования большого числа каскадов вторичных частиц [2, 3]. Для каждой частицы, входящей в состав каскада, проводится численное моделирование процессов распространения и взаимодействия. Одним из основных преимуществ статистического моделирования является возможность включения в расчеты большого числа процессов.

Результаты численного моделирования дифференциального потока нейтронов в атмосфере, представленные в работе [4], отличаются от данных измерений более чем в 1,5 раза в области энергий нейтронов порядка 100 МэВ. Нейтроны этих энергий вносят существенный вклад в образование космогенных нуклидов в реакциях скалывания. Применение более совершенных теоретических моделей и компьютерных программ позволяет уточнить результаты предшествующих расчетов и выявить новые закономерности. Этому вопросу посвящена данная работа.

Галактические космические лучи

В области энергий, больших чем несколько сотен мегаэлектрон-вольт, основной вклад в поток космических лучей вносят потоки частиц галактического происхождения, причем 90 % от их полного числа составляют протоны и около 10 % — альфа-частицы; ядра других химических элементов — 1 %. Поток галактических космических лучей обладает высокой степенью изотропии [5].

Для энергий частиц ниже 10 ГэВ/нуклон поток галактических космических лучей в околоземном пространстве зависит от уровня солнечной активности. Выражение для дифференциального энергетического спектра частиц сорта i с массовым и зарядовым числами A_i и Z_i в модели «силового поля» имеет вид [6]:

$$J_i\left(E,\varphi\right) = \\ = J_{i,\,\text{БМП}}\left(E+\Phi_i\right)\frac{E\left(E+2m_pc^2\right)}{\left(E+\Phi_i\right)\left(E+\Phi_i+2m_pc^2\right)}, \quad (1)$$

где $J_{i,\,\text{БМП}}\left(E\right)$ — дифференциальный энергетический спектр i-компоненты космических лучей в ближнем межзвездном пространстве (БМП); E — кинетическая энергия частицы на один нуклон; m_pc^2 — энергия покоя протона; $\Phi_i = \left(eZ_i/A_i\right)\varphi$ (e — заряд электрона); φ — параметр модуляции космических лучей в гелиосфере.

В качестве аппроксимации величины $J_{i,\,\text{БМП}}\left(E\right)$ используется выражение из работы [7]:

$$J_{i,\,\text{БМП}}\left(E\right) = C_i\frac{p\left(E\right)^{-2,78}}{1+0,487\,p\left(E\right)^{-2,51}}, \quad (2)$$

где параметр E в ГэВ/нуклон соответствует кинетической энергии частицы, $p\left(E\right) = \sqrt{E\left(E+2m_pc^2\right)}$; C_i — нормировочный множитель, причем для протонов $C_p = 1,9\cdot10^4$ (м^2·с·стер·ГэВ)$^{-1}$, для ядер гелия $C_{\text{He}} = 9,5\cdot10^2$ (м^2·с·стер·ГэВ/нуклон)$^{-1}$.

Согласно исследованию [7], значения параметра модуляции φ, восстановленные по данным нейтронных мониторов за период времени 1951–

2004 гг., лежат в диапазоне от 0,3 до 1,3 ГВ, а среднее значение φ составляет 0,69 ГВ. Это значение параметра модуляции и было выбрано в расчетах.

Энергетический спектр и его форма в области низких энергий определяется отношением зарядового числа к массовому. Для ядер с зарядовыми числами $Z \geq 2$ приближенно верно отношение $Z/A \approx 1/2$. Вклад ядер, имеющих $Z \geq 2$, в потоки частиц вторичного космического излучения определяется как произведение результатов, полученных для ядер гелия ^{4}He, и коэффициента k — отношения потока нуклонов, обусловленного ядрами элементов $Z \geq 2$ галактических космических лучей, к потоку нуклонов, обусловленному ядрами ^{4}He. На основе параметров энергетических спектров, представленных в работе [8], было получено значение $k = 1{,}44$. В данных расчетах предполагается, что все ядра $Z = 2$ — ядра ^{4}He, т. е. не учитывается содержание изотопа ^{3}He в общем гелиевом потоке.

Для геомагнитных широт $\lambda > 60^\circ$ вертикальная жесткость геомагнитного обрезания, как правило, не превышает 1 ГВ [9], что соответствует кинетическим энергиям протонов около 430 МэВ и ядер гелия-4 — около 125 МэВ/нуклон. В данной работе не рассматривалось геомагнитное обрезание дифференциального энергетического спектра космических лучей, поэтому результаты расчетов применимы только для высоких геомагнитных широт.

Модель атмосферы

В численной модели радиус Земли принимался равным 6371 км, высота атмосферы — 100 км. Также полагалось, что поверхностный слой Земли состоит изо льда H_2O. Атмосфера моделировалась набором концентрических слоев с постоянной плотностью воздуха в пределах каждого слоя, толща которого принималась равной 30 г/см^2. Полная толща атмосферы считалась равной 1034 г/см^2. На рис. 1 представлена зависимость плотности воздуха от высоты, которая использовалась в расчетах. Точки на кривой соответствуют средней плотности воздуха в области северных широт выше 60 °N [10]. Содержание химических элементов в атмосфере считалось соответствующим стандарту США 1976 года [11]; т. е. содержание азота (в массовых долях) полагалось равным 0,755, кислорода — 0,232, аргона — 0,013. До высот около 80 км относительное содержание основных элементов в атмосфере

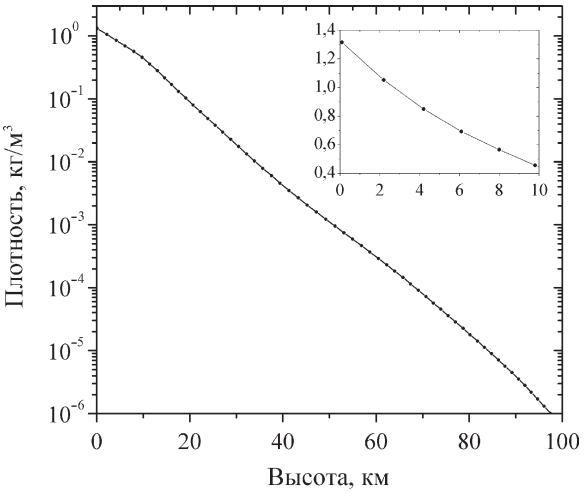


Рис. 1. Распределение по высоте средней плотности воздуха в атмосфере Земли.
Область северных широт (выше 60 °N). На вставке — фрагмент зависимости для диапазона малых высот

слабо зависит от высоты вследствие перемешивания воздушными потоками.

Физическая модель

Численный код для моделирования каскадов частиц вторичного космического излучения был написан на основе системы программ GEANT4 9.4 [12]. В расчетах учитывались процессы рождения, распространения и взаимодействия барионов (нейтроны, протоны, короткоживущие барионы, а также их античастицы), лептонов (электроны, позитроны, мюоны), мезонов (пионы и каоны), легких ядер, а также гамма-квантов. В моделировании электромагнитных взаимодействий использовался стандартный набор процессов [13]. Частицы электронно-фотонной компоненты вторичного космического излучения с энергиями меньше 10 МэВ не рассматривались. Для описания процессов неупругого рассеяния адронов на ядрах использовались низко- и высокоэнергетические модели, основанные на параметризации экспериментальных данных. Для моделирования процессов неупругого рассеяния нуклонов и мезонов на ядрах в диапазоне энергий до 6 ГэВ использовалась модель внутриядерного каскада Бертини. Неупругие взаимодействия легких ядер описывались с помощью модели внутриядерного бинарного каскада. В расчетах учитывались процессы захвата отрицательных мезонов, а также процессы захвата и расщепления ядер нейтронами. Для описания

процессов взаимодействия нейтронов с ядрами в области энергий меньше 20 МэВ использовались данные библиотек ENDF-B VI, JENDL и др., в области энергий от 20 МэВ до 3 ГэВ — данные JENDL/HE. В моделировании учитывались фотоядерные и электроядерные процессы, а также процессы распада [13].

Определим всенаправленный дифференциальный поток частиц сорта *i*:

$$I_i^{\text{д}}(E) = \int\limits_{4\pi} d\Omega J_i(E),$$

где $J_i(E)$ — направленный дифференциальный поток (энергетический спектр) этих частиц.

Всенаправленный интегральный поток частиц сорта *i* с энергией, превышающей E_0, выражается как

$$I_i^{\text{и}}(>E_0) = \int\limits_{E_0}^{\infty} dE\ I_i^{\text{д}}(E) = \int\limits_{E_0}^{\infty} dE \int\limits_{4\pi} d\Omega J_i(E).$$

Для значений параметров $\varphi = 0{,}69$ ГВ и $E_0 = 100$ МэВ всенаправленный интегральный поток протонов и ядер гелия галактических космических лучей составляет 2,66 $\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$ и 0,27 $\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$, соответственно.

Поток частиц галактических космических лучей с энергией, большей E_0, через единицу площади верхней границы атмосферы следует выражению

$$F_{0i} = \int\limits_{2\pi} d\Omega \cos\theta \int\limits_{E_0}^{\infty} dE\, J_{0i}(E) = \pi \int\limits_{E_0}^{\infty} dE\, J_{0i}(E),$$

где $J_{0i}(E)$ — направленный дифференциальный поток частиц галактических космических лучей сорта *i* в околоземном пространстве, θ — угол между вектором импульса частицы и направлением на точку надира.

Распределение числа частиц по углу θ, попадающих в атмосферу через единицу площади, удовлетворяет соотношению $dF_{0i}/d\cos\theta \sim \cos\theta$.

Всенаправленный дифференциальный поток частиц сорта *k* энергией *E* в мишени на глубине *h* рассчитывался по формуле

$$I_k^{\text{д}}(E,h) \approx \frac{F_{0i}}{N_{0i}\,\Delta E} \sum_l \frac{1}{\left|\cos\theta_{lk}\right|}, \qquad (3)$$

где N_{0i} — число частиц первичных космических лучей сорта *i*; θ_{lk} — зенитный угол частицы сорта *k*; *l* — индекс суммирования, причем суммирование производится по всем частицам сорта *k*, которые пересекают заданный уровень *h* в мишени и имеют энергии в интервале $[E - \Delta E/2,\ E + \Delta E/2]$.

В сумме (3) не учитывались частицы, у которых $\left|\cos\theta_{lk}\right| < 0{,}001$ для атмосферных слоев.

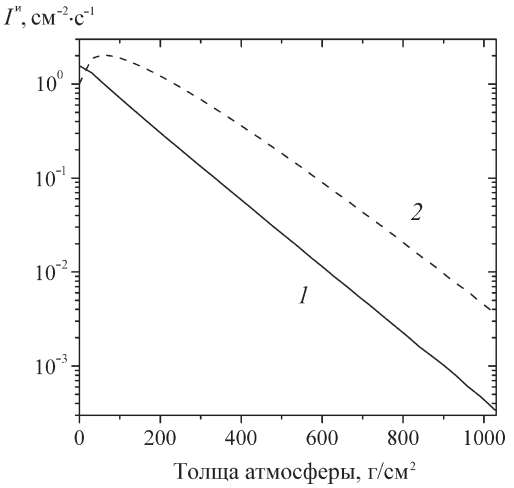


Рис. 2. Расчетные зависимости всенаправленных интегральных потоков нуклонов от толщи атмосферы:

1 — протонов всех энергий, *2* — нейтронов с кинетическими энергиями $E > 10$ МэВ. Отсчет толщи от верхнего края атмосферы

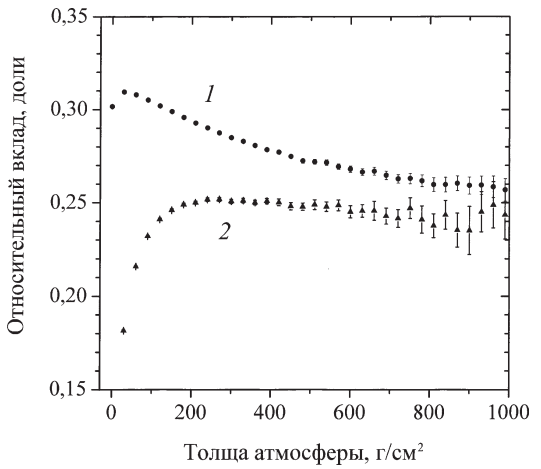


Рис. 3. Зависимости относительных вкладов ядер $Z \geq 2$ галактических космических лучей в потоки нейтронов (*1*) и протонов (*2*) от толщи атмосферы Земли.

Указанные погрешности соответствуют одной стандартной статистической ошибке среднего значения

Число первичных протонов и альфа-частиц, для которых проводилось численное моделирование, составило 5 млн. и 2 млн., соответственно. Энергия частиц разыгрывалась согласно дифференциальному энергетическому спектру (1), (2) в диапазоне энергий от 100 МэВ до 1000 ГэВ для протонов и от 100 МэВ/нуклон до 1000 ГэВ/нуклон для ядер гелия. В связи с отсутствием в GEANT4 модели ядерных взаимодействий для легких ядер с энергией, превышающей 10 ГэВ/нуклон, первичные альфа-частицы этих энергий моделировались как четыре несвязанных нуклона.

Расчеты проводились на кластере Санкт-Петербургского филиала Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Результаты и обсуждение

На рис. 2 приведены результаты расчетов всенаправленных интегральных потоков протонов и высокоэнергетичных нейтронов, кинетическая энергия которых превышает 10 МэВ. Согласно данным измерений [14] длина ослабления интегрального всенаправленного потока высокоэнергетичных нейтронов для высот до 3,5 км в атмосфере составляет 131 г/см^2. Расчетное значение данного параметра составило 132 г/см^2.

Согласно результатам расчетов, вклад ядер $Z \geq 2$ первичных космических лучей в потоки частиц вторичного космического излучения составляет около 25 % (рис. 3). Основной вклад в потоки частиц вторичного космического излучения вносят частицы первичных космических лучей энергией от 1 до 10 ГэВ/нуклон. Для таких энергий доля ядер $Z \geq 2$ в потоки галактических космических лучей составляет около 25–30 % по числу нуклонов. Приведенный результат соответствует условиям высоких геомагнитных широт и среднего уровня солнечной активности.

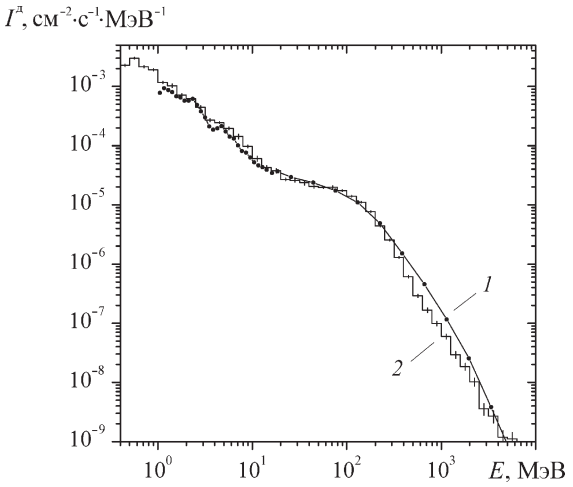


Рис. 4. Экспериментальная [14] (*1*) и расчетная (*2*) зависимости всенаправленного дифференциального потока нейтронов от их энергии

Расчеты выполнены для условий высоких геомагнитных широт, среднего уровня солнечной активности и толщи атмосферы 1020 г/см^2

На рис. 4 представлены результаты расчета энергетической зависимости всенаправленного

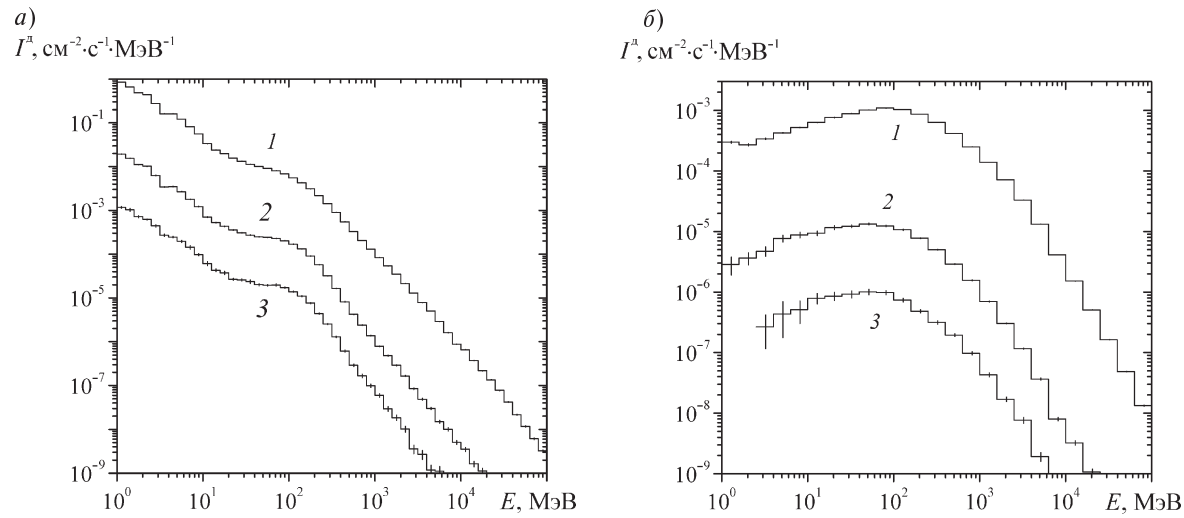


Рис. 5. Расчетные зависимости всенаправленных дифференциальных потоков нейтронов (*а*) и протонов (*б*) от их энергии для разных значений толщи атмосферы, г/см^2: 90 (*1*), 690 (*2*), 1020 (*3*).

Указанные погрешности соответствуют одной стандартной статистической ошибке среднего значения

дифференциального потока нейтронов для толщи атмосферы 1020 г/см^2. Для сравнения там же приведена энергетическая зависимость дифференциального потока нейтронов по данным исследования [14] для рассматриваемых геофизических условий. В области энергий нейтронов 10–300 МэВ наблюдается хорошее согласие расчетных данных с результатами измерений — в пределах 30 %. Нейтроны этих энергий вносят основной вклад в образование космогенных нуклидов в реакциях скалывания. Отличие расчетного и экспериментального дифференциальных потоков в области энергий нейтронов более 400 МэВ существенно и достигает 200 %. Одной из возможных причин такого расхождения могут являться завышенные значения полных сечений неупругого взаимодействия нейтронов с ядрами JENDL/HE в данной области энергий.

На рис. 5 представлены энергетические зависимости всенаправленных дифференциальных потоков нуклонов для разных величин толщи атмосферы; форма этих зависимостей практически не зависит от глубины в атмосфере.

Итак, в работе приведены результаты статистического моделирования процессов распространения космического излучения и его взаимодействия с атмосферой Земли для условий высоких геомагнитных широт и среднего уровня солнечной активности. Численное моделирование проводилось для каскадов частиц, инициированных протонами и альфа-частицами галактических космических лучей. Полученные результаты могут быть применены для расчета скоростей образования космогенных нуклидов как в атмосфере, так и в горных породах и полярных льдах.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (договор 11.G34.31.0001 с СПбГПУ и ведущим ученым Г.Г. Павловым).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **O'Brien, K.** Calculated cosmic ray pion and proton fluxes at sea level [Text] / K. O'Brien // J. of Physics A: Mathematical and General.— 1975.— Vol. 8.— No. 9.— P. 1530–1534.

2. **Lumme, M.** Cosmic-ray spectra as calculated from atmospheric hadron cascades [Text] / M. Lumme, M. Nieminen, J. Peltonen [et al.] // J. of Physics G: Nuclear and Particle Physics— 1984.— Vol. 10.— No 5.— P. 683–694.

3. **Masarik, J.** Terrestrial cosmogenic-nuclide production systematics calculated from numerical simulations [Text] / J. Masarik, R.C. Reedy // Earth and Planetary Science Letters— 1995.— Vol. 136.— P. 381–395.

4. **Masarik, J.** An updated simulation of particle fluxes and cosmogenic nuclide production in the Earth's atmosphere [Text] / J. Masarik, J. Beer // J. of Geophysical Research— 2009.— Vol. 114.— No. D11.— CiteID D11103.

5. **Блинов, А.В.** Космические лучи [Текст]: учеб. пос. для вузов / А.В. Блинов.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2006.— 154 с.

6. **Gleeson, L.J.** Solar modulation of galactic cosmic rays [Text] / L.J. Gleeson, W.I. Axford // Astrophysical J.— 1968.— Vol. 154.— P. 1011–1026.

7. **Usoskin, I.G.** Heliospheric modulation of cosmic rays: Monthly reconstruction for 1951–2004 [Text] / I.G. Usoskin, K. Alanko-Huotari, G.A. Kovaltsov [et al.] // J. of Geophysical Research.— 2005.— Vol. 110.— No. A12.— CiteID A12108.— 10 p.

8. **Wiebel-Sooth, B.** Cosmic rays. VII. Individual element spectra: prediction and data [Text] / B. Wiebel-Sooth, P.L. Biermann, H. Meyer // Astronomy and Astrophysics— 1998.— Vol. 330.— P. 389–398.

9. **Shea, M.A.** A world grid of calculated cosmic ray vertical cutoff rigidities for 1980 [Text] / M.A. Shea, D.F. Smart // Proc. from the 18th International Cosmic Ray Conference. Bangalore, India, 22 August— 3 September 1983.— Vol. 3.— P. 415.

10. Cospar International Reference Atmosphere (CIRA 86) [Электронный ресурс], http://badc.nerc.ac.uk/browse/badc/cira.

11. U.S. Standard Atmosphere 1976 [Text]: Committee on Extension to the Standard Atmosphere (COESA) / Cochairmen M. Dubin, A.R. Hull, K.S.W. Champeon.— Washington D.C.: U.S. Government Printing Office, 1976.— 241 p.

12. **Agostinelli, S.** Geant4— a simulation toolkit [Text] / S. Agostinelli, J. Allisonas, K. Amakoe [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.— 2003.— Vol. 506.— P. 250–303.

13. Geant4 Physics reference manual [Электр. ресурс] http://geant4.cern.ch/support/index.shtml.

14. **Gordon, M.S.** Measurement of the flux and energy spectrum of cosmic-ray induced neutrons on the ground [Text] / M.S. Gordon, P. Goldhagen, K.P. Rodbell [et al.] // IEEE Transactions on Nuclear Science.— 2004.— Vol. 51.— No. 6.— P. 3427–3434.

УДК 533.9

Ю.А. Кропотина, М.Ю. Густов,
А.М. Красильщиков, К.П. Левенфиш, Г.Г. Павлов

МНОГОПРОЦЕССОРНЫЙ ТРЕХМЕРНЫЙ ГИБРИДНЫЙ КОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЕ

Теоретическое исследование бесстолкновительных процессов в космической плазме представляет большой интерес для современной астрофизики, поскольку такие процессы играют большую роль в динамике источников с экстремальным энерговыделением, в частности, остатков сверхновых звезд, пульсарных туманностей и активных галактических ядер. Поскольку задачи, связанные с изучением микроскопических процессов в плазме, являются существенно нелинейными, аналитические подходы не позволяют далеко продвинуться в их решении. С другой стороны, численное моделирование, основанное на фундаментальных физических законах, позволяет давать как качественные, так и количественные интерпретации современных многоволновых наблюдений космических объектов с экстремальным энерговыделением, и оценивать параметры этих объектов.

Конкретная методика численного моделирования выбирается в зависимости от пространственных и временных масштабов исследуемых процессов [1]. В случае, когда динамика плазменной системы в основном определяется ионами, пространственные и временные масштабы для которых существенно больше, чем для электронов, одним из эффективных методов является гибридное моделирование, в котором ионы описываются как частицы, а электроны представлены как безмассовая нейтрализующая жидкость. Такой подход расширяет область параметров, в которой можно производить моделирование, и незаменим на данном этапе развития вычислительной техники для исследования крупномасштабных процессов. Следует отметить, что экономия вычислительных ресурсов за счет использования пространственно одномерных или двумерных кодов с учетом электронов в виде частиц ведет к возникновению нефизических эффектов [2, 3] и не может быть признана адекватной.

Однако даже в приближении жидких электронов вычислительные ресурсы, требуемые для создания трехмерных моделей, превышают возможности современных персональных компьютеров, в связи с чем необходимо создание кодов, способных работать на многопроцессорных кластерах.

В данной работе представлен трехмерный гибридный код второго порядка точности по времени и координате, адаптированный для работы на многопроцессорных вычислительных системах, и дан пример его использования для моделирования резонансной ион-ионной неустойчивости в космической плазме.

Система уравнений для микроскопического описания бесстолкновительной плазмы

В целях уменьшения погрешности, связанной с машинной точностью, рационально использовать безразмерные физические величины, для чего выбрана следующая нормировка [4, 5]:

$$\tilde{t} = t \cdot \Omega; \quad (1)$$

$$\tilde{r} = r / l_i; \quad (2)$$

$$\tilde{B} = B / B_0; \quad (3)$$

$$\tilde{\rho} = \rho / \rho_0, \quad (4)$$

где B_0, ρ_0 — индукция магнитного поля и плотность в невозмущенной плазме (в случае моделирования ударной волны нормировочные величины берутся перед фронтом), $\Omega = eB_0 / mc$ — циклотронная частота, $l_i = c/\omega$ — инерционная длина иона, $\omega = (4\pi\rho_0 e^2 / m^2)^{1/2}$ — плазменная частота, e, m — заряд и масса протона, c — скорость света.

В подавляющем большинстве астрофизических задач исследуется плазма, преимущественно состоящая из водорода, поэтому здесь приведены нормировочные параметры для водородной

плазмы. Из нормировок (1) и (2) следует, что скорости измеряются в альвеновских скоростях, т. е. вместо скорости налетающего потока задается число Маха:

$$\tilde{V} = V / V_a \equiv M_a,$$

где $V_a = B_0 / \sqrt{4\pi\rho_0}$.

Заряды и массы частиц измеряются в зарядах и массах протона. Однако представленный код позволяет моделировать также и многокомпонентную плазму, при этом для нормировки используются взвешенные величины, а вид уравнений не меняется.

Поскольку ионы описываются как частицы, для них используется уравнение Лоренца движения в электромагнитном поле. К этим уравнениям добавляются уравнения Максвелла для вычисления полей и уравнение Эйлера для описания движения электронов. В приведенной нормировке система уравнений, определяющая поведение системы, может быть записана в следующем виде [6]:

$$\frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \mathbf{V}_k; \tag{5}$$

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{Z_k}{m_k}(\mathbf{E} + \mathbf{V}_k \times \mathbf{B}); \tag{6}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{J}; \tag{7}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}; \tag{8}$$

$$n_e m_e \frac{d\mathbf{u}_e}{dt} = -n_e \mathbf{E} + \mathbf{J}_e \times \mathbf{B}. \tag{9}$$

В системе (5)–(9) $\mathbf{r}_k$, $\mathbf{V}_k$ — координаты и скорости k-го сорта частиц. Z_k, m_k — заряд и масса в единицах заряда и массы протона, $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ — электрическое и магнитное поля, $\mathbf{u}_e$, n_e — скорость потока и концентрация электронов соответственно; $\mathbf{J}_e$ — ток электронов, $\mathbf{J}$ — электрический ток. Они вычисляются по следующим формулам:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_i + \mathbf{J}_e; \tag{10}$$

$$\mathbf{J}_i = \sum_k \mathbf{J}_k; \tag{11}$$

$$\mathbf{J}_k = Z_k \cdot (n\mathbf{u})_k, \tag{12}$$

где $\mathbf{J}_i$, $\mathbf{J}_k$ — токи ионов и частиц сорта k; $(n\mathbf{u})_k$ — среднее значение произведения скорости на концентрацию для данного сорта частиц.

Если пренебречь массой электрона по сравнению с массой протона и учесть квазинейтральность

$$n_e = \sum_k Z_k n_k \equiv n,$$

то уравнение (9) можно переписать в следующем виде:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{n}(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} - \frac{1}{n}(\mathbf{J}_i \times \mathbf{B}). \tag{13}$$

Для дальнейших вычислений удобнее привести его к виду

$$\mathbf{E}_k = -\frac{1}{n}(\mathbf{J}_i \times \mathbf{B})_k - \frac{1}{n}\frac{\partial P^B_{jk}}{\partial x_j}, \tag{14}$$

где $P^B_{jk} = \frac{B^2}{2}\delta_{jk} - B_j B_k$ — тензор магнитного давления.

Алгоритм работы гибридного кода

Как видно из уравнений (5) — (9), поля и частицы взаимно зависимы, что делает задачу самосогласованной. Задачи такого рода удобно решать с помощью известного метода липфрог («leapfrog»), имеющего второй порядок точности по времени. При этом значения электромагнитного поля известны на четных шагах, а положения частиц — на нечетных.

Структура уравнений для вычисления электромагнитных полей аналогична структуре уравнений магнитной гидродинамики (МГД), вследствие чего используются сходные методы решения. Для их реализации вводится декартова пространственная сетка. На гранях ячеек задаются нормальные значения магнитного поля, для вычисления приращения которых используются значения электрического поля на ребрах сетки [7].

Основная последовательность операций после инициализации начальных параметров соответствует стандартному алгоритму работы гибридного кода [4–6]. Циклически поочередно выполняются следующие процедуры.

1. Вычисление моментов (Moment collector). На основе текущих положений и скоростей частиц производится подсчет плотностей и токов во всех ячейках по формулам (11), (12).

2. Вычисление электромагнитных полей (Field solver). С использованием уравнений (7), (8), (14) вычисляются электрические и магнитные поля в ячейках.

3. Перемещение частиц (Particle mover). Производится перемещение и изменение скоростей всех частиц согласно уравнениям (5), (6).

Код реализован на языке C++ с использованием методов объектно-ориентированного программирования.

Вычисление моментов. При вычислении моментов в каждой ячейке производится суммирование по всем находящимся в ней частицам. Эффект дискретизации приводит к возникновению численных шумов на этом шаге. Распространенным методом их подавления является введение макрочастиц — частиц конечного размера [8, 9]. Однако тесты показали, что применение метода макрочастиц практически не меняет уровень флуктуаций. При этом ресурсоемкость увеличивается в восемь раз (для трехмерного кода). В связи с этим в коде используется точечное представление частиц.

Алгоритм вычисления электромагнитных полей. В коде используется алгоритм вычисления магнитного поля с сохранением нулевой дивергенции, основанный на методе Годунова для решения уравнений МГД [7, 10, 11]. Он включает параболическую реконструкцию магнитного поля внутри ячейки [7] и линеаризованную задачу о распаде разрыва (Riemann solver) [10, 12].

Для реализации трехмерного бездивергентного алгоритма вводятся значения нормальной компоненты магнитного поля на гранях и значения электрического поля на ребрах. Считается, что центр ячейки имеет целые координаты, а грани — полуцелые.

Для повышения точности при вычислении электрического поля, а также приращений магнитного используется дополнительное разбиение по времени. За время одного шага по времени Δt с неизменным положением частиц и неизменной конфигурацией токов, n раз выполняется алгоритм Cyclic Leapfrog [5, 6] с шагом $dt = \Delta t / n$:

$$\mathbf{B}_0^0 = \mathbf{B}(t);$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots,$$

$$\begin{cases} \mathbf{B}_1^i = \mathbf{B}_0^i - dt \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_0^i), \\ \mathbf{B}_1^i = B_0^i - dt \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_1^i), \\ \mathbf{B}(t+dt) = 0,5(\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_2), \end{cases}$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots,$$

$$\mathbf{B}(t+\Delta t) \equiv \mathbf{B}(t+n dt).$$

На каждом шаге dt решается задача Римана для расчета электрического поля на ребрах, а затем вычисляется магнитное поле на гранях. При этом выполняются следующие действия.

1. С использованием известных значений нормальной компоненты магнитного поля на гранях строится реконструкция поля внутри ячейки [7]:

$$B_x(x,y,z) =$$

$$= a_0 + a_x x + a_y y + a_z z + a_{xx} x^2 + a_{xy} xy + a_{xz} xz;$$

$$B_y(x,y,z) =$$

$$= b_0 + b_x x + b_y y + b_z z + b_{xy} xy + b_{yy} y^2 + b_{yz} yz;$$

$$B_z(x,y,z) =$$

$$= c_0 + c_x x + c_y y + c_z z + c_{xz} xz + c_{yz} yz + c_{zz} z^2. \quad (13)$$

Для выполнения условия сохранения нулевой дивергенции магнитного поля коэффициенты разложения рассчитываются следующим образом:

$$a_x = \frac{(B_x^{i+1/2} - B_x^{i-1/2})}{\Delta x};$$

$$a_y = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_y B_x^{i+1/2}}{\Delta y} + \frac{\Delta_y B_x^{i-1/2}}{\Delta y} \right);$$

$$a_z = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_z B_x^{i+1/2}}{\Delta z} + \frac{\Delta_z B_x^{i-1/2}}{\Delta z} \right);$$

$$a_{xy} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\Delta_y B_x^{i+1/2}}{\Delta y} - \frac{\Delta_y B_x^{i-1/2}}{\Delta y} \right);$$

$$a_{xz} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\Delta_z B_x^{i+1/2}}{\Delta z} - \frac{\Delta_z B_x^{i-1/2}}{\Delta z} \right);$$

$$a_{xx} = -\frac{1}{2}(b_{xy} + c_{xz});$$

$$a_0 = \frac{(B_x^{i+1/2} + B_x^{i-1/2})}{2} - a_{xx} \frac{\Delta x^2}{4}.$$

Система обозначений пояснена на рис. 1, изображающем ячейку с координатами (i, j, k).

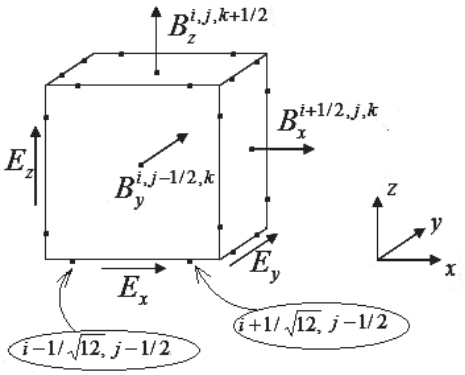


Рис. 1. Ячейка декартовой сетки. Магнитные поля заданы на гранях, электрические — на ребрах сетки; обозначены точки, в которых решается задача Римана для нахождения значений электрического поля

Реконструкция производится с использованием лимитера minmod:

$$\frac{\Delta_y B_x^{i+1/2}}{\Delta y} =$$

$$= \min\bmod\left(B_x^{i+1/2,j+1} - B_x^{i+1/2,j}, B_x^{i+1/2,j} - B_x^{i+1/2,j-1}\right),$$

где

$$\min\bmod(a,b) = \begin{cases} \operatorname{sign}(a)\min(|a|,|b|), & \text{если } ab > 0; \\ 0, & \text{если } ab \le 0. \end{cases}$$

2. Для нахождения значения электрического поля на ребрах решается задача Римана о распаде разрыва, возникающего на границах ячеек после реконструкции поля. Для достижения второго порядка точности значение электрического поля на ребре аппроксимируется полиномом третьей степени по координате. Это приближение позволяет представить среднее электрическое поле каждого ребра как полусумму значений поля в двух его точках, обозначенных на рис. 1. Поскольку ребро является совмещенной границей четырех ячеек, задача о распаде разрыва в обеих точках решается дважды (на каждой прилегающей грани), а результат усредняется.

3. С использованием полученного значения электрического поля на ребрах, из уравнения (8) находится приращение магнитного поля на гранях.

По окончании цикла «leapfrog» выполняется финальная стадия алгоритма, отличающаяся от промежуточных шагов:

шаг 1 выполняется так же, как и на промежуточной стадии;

на шаге 2 задача Римана решается не для ребер, а для граней ячеек; при этом находятся компоненты тензора магнитного давления P_{ij}. Для достижения второго порядка точности по координате используется полиномиальное разложение P_{ij} на грани, и задача Римана решается в четырех точках;

на шаге 3 электрическое поле в ячейке вычисляется путем численного дифференцирования значений P_{ij} на гранях. Таким образом, на шаге Field solver считается только градиентная часть электрического поля (второе слагаемое в правой части уравнения (14)). Часть, связанная с током ионов, рассмотрена в следующем разделе.

Магнитное поле в ячейке считается путем усреднения реконструкции (13). При этом среднее значение компоненты поля следует выражению [7]:

$$B_x^{ijk} = \frac{(B_x^{i+1/2} + B_x^{i-1/2})}{2} - a_{xx}\frac{\Delta x^2}{6}.$$

Движение частиц. Как отмечено выше, в коде используется метод «leapfrog», т. е. для осуществления перемещения частиц $t \to t + \Delta t$ используются значения электрического и магнитного поля в момент времени $t + 0,5\Delta t$. Значения магнитного поля и градиентной части электрического поля определяются на шаге Field solver. Однако для корректного учета в уравнении (14) слагаемого, зависящего от тока ионов, необходимо аппроксимировать его изменение в течение шага по времени, вызванное движением частиц. Для этого на шаге Particle mover производится линейная экстраполяция тока ионов и в линейном приближении учитывается изменение электрического поля на протяжении шага по времени, что позволяет сохранить второй порядок точности по времени при решении самосогласованной задачи и избежать накопления ошибки, приводящего к нефизическим эффектам. Здесь следует отметить, что линейная экстраполяция динамики электрического поля в течение шага по времени некорректна в случае введения частиц конечного размера.

Перемещения частиц вычисляются при помощи разложения формул (5), (6) в ряд Тейлора, что упрощает учет динамики электрического поля. Разложение осуществляется до четвертого порядка во избежание внесения в вычисле-

ния дополнительной погрешности на шаге Particle mover.

Применимость использованного метода. Метод «leapfrog», реконструкция магнитного поля, полиномиальная аппроксимация электрического поля при решении задачи Римана и самосогласованный учет динамики электрического поля при движении частиц обеспечивают второй порядок точности алгоритма по времени и координате.

Для проверки адекватности результатов моделирования необходимо контролировать выполнение фундаментальных законов сохранения в течение работы кода. Как было показано выше, алгоритм вычисления полей обеспечивает точное сохранение нулевой дивергенции магнитного поля.

Тесты показали выполнение законов сохранения энергии и импульса с точностью второго порядка по времени при корректно выбранных параметрах дискретизации, как показано ниже.

Как отмечено выше, в коде используется декартова система координат с равномерным разбиением. Размер ячейки, в зависимости от поставленной задачи, может варьироваться от $0,1 l_i$ до нескольких инерционных длин иона [4]. Нижний предел связан с корректностью приближения безмассовых электронов, поскольку на мелких масштабах становятся существенными электронные эффекты. Верхний предел определяется минимальными характерными длинами исследуемых процессов. Шаг по времени не должен превышать $0,2\ \Omega^{-1}$ для хорошего разрешения траектории движения иона в магнитном поле [4]. Кроме того, соотношение временного и пространственного шагов должно быть таким, чтобы частица за один шаг по времени проходила расстояние меньше размера ячейки (критерий Куранта). Во многих задачах критерий Куранта оказывается жестче, и шаг по времени определяется им.

Ограниченное число частиц в ячейке приводит к появлению численного шума при вычислении электрических и магнитных полей. Численный шум возникает не только при исследовании неравновесных процессов, но и в простом тестовом примере — моделировании однородно распределенного водорода в постоянном магнитном поле. При этом наблюдается генерация флуктуаций поля, уровень которых хорошо описывается зависимостью

$$\left\langle \delta B^2 \right\rangle \approx \left\langle B^2 \right\rangle / N,$$

где N — число частиц в ячейке.

Такая зависимость указывает на статистическую природу флуктуаций, связанную со случайным распределением частиц в начальный момент времени. Эффективный способ подавления этих флуктуаций — увеличение числа частиц в ячейке, однако это ведет к уменьшению статистического веса частиц и увеличению погрешности, связанной с точностью машинного числа, а также к существенному росту потребляемых машинных ресурсов.

В большинстве решаемых задач число частиц в ячейке составляло 100–200, что обеспечивало среднеквадратичный уровень флуктуаций не более 10 %. Фактическое число частиц в физических задачах на много порядков больше, чем число частиц, которое возможно реализовать в программе, поэтому каждая частица в ячейке может быть интерпретирована как совокупность множества ионов и при вычислении моментов она суммируется с определенном весом.

Распараллеливание вычислений. В связи с большой ресурсоемкостью трехмерного алгоритма код адаптирован для многопроцессорного моделирования с использованием технологии MPI (обмен сообщениями между процессорами) [13]. Поскольку на практике часто приходится моделировать области с размером вдоль одной координаты, существенно превышающим размеры по двум другим, распараллеливание программы было осуществлено путем разделения пространства моделирования между несколькими процессорами и введения нового типа граничных условий — границы между областями, обрабатываемыми в различных процессорах. На этой границе на каждом шаге вычислений происходит обмен значениями величин поля и потоков частиц между процессорами, обрабатывающими две соседние области. Для реализации процедуры обмена создаются вспомогательные ячейки пространственной сетки.

Использование технологий параллельного программирования позволяет на порядки увеличить физический размер области моделирования, точность и скорость расчета. Следует отметить, что разделение области вычислений между процессорами рационально только в случае, когда длина, приходящаяся на один процессор, составляет как минимум 3 ячейки. В противном случае ресурсы памяти, необходимые для реализации

вспомогательных ячеек, превысят ресурсы, потребляемые вычислительной частью.

Пример использования кода для моделирования резонансной ион-ионной неустойчивости

В работе [4] приведен пример моделирования задачи о возникновении резонансной электромагнитной ион-ионной неустойчивости. Ниже приведены результаты аналогичных расчетов для демонстрации корректной работы кода на примере аналитически решаемой задачи. Резонансная ион-ионная неустойчивость возникает при прохождении слабого ($n_1 << n_0$) пучка ионов через равновесную фоновую плазму (n_i, $n_0 = n_i + n_1$) вдоль однородного магнитного поля B_{0x} с относительной скоростью $V_1 >> V_a$. Взаимодействие протонного пучка с протонной фоновой плазмой рассматривается в системе покоя нейтрализующих электронов. В ней пучок движется со скоростью $V_1(1 - n_1 / n_0)$, а фоновая плазма — со скоростью $V_i = -(n_1 / n_0)V_1$. В таких условиях возникают нарастающие резонансные циклотронные колебания. В работе [4] при помощи одномерного гибридного кода смоделирована неустойчивость плазмы со следующими параметрами: скорость пучка относительно фоновой плазмы $V_1 = 10V_a$; отношение $n_1 / n_0 = 0{,}015$; отношение теплового к магнитному давлению $\beta \equiv 8\pi n_0 T_j / B_0 = 1$ для пучка и для фоновой плазмы. Трехмерные расчеты с теми же параметрами привели к результатам, согласующимся с приведенными в работе [4].

На рис. 2 показаны результаты моделирования — фазовое пространство, а также профили магнитного поля и плотности пучка. Все величины приведены в нормировке по формулам (1)–(4). Вывод данных был осуществлен в момент времени $t = 40\Omega^{-1}$. К этому моменту произошло суще-

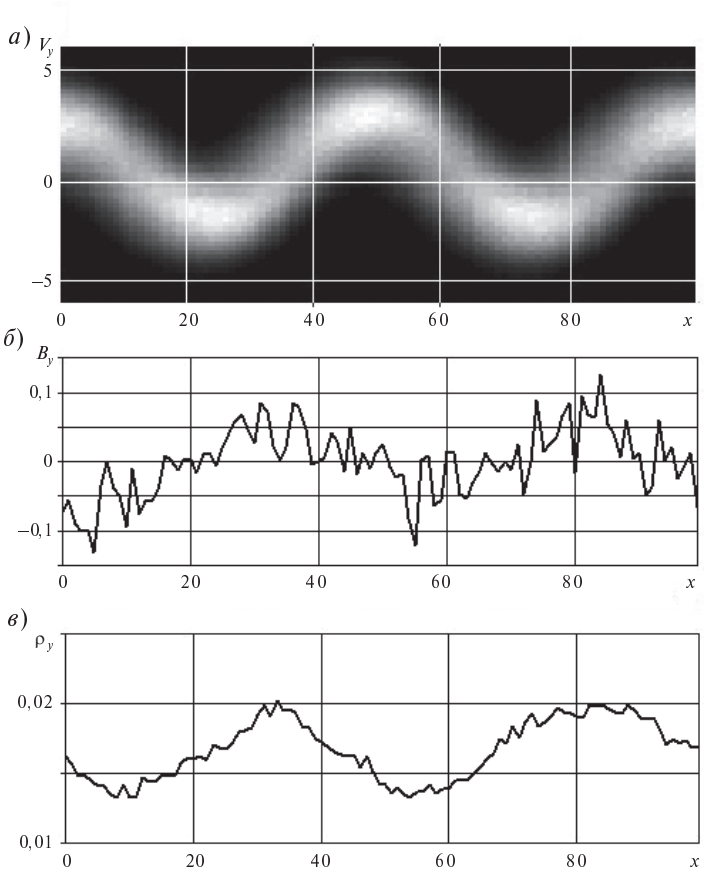


Рис. 2. Результат трехмерного гибридного моделирования резонансной неустойчивости:
а — фазовое пространство x–V_y пучка;
б, *в* — профили магнитного поля и плотности пучка в момент времени $t = 40\Omega^{-1}$

ственное нарастание гармоник с длиной волны, близкой к $50l_i$, что согласуется с теоретическими предсказаниями. Соответствующие гармоники наблюдаются как для скорости, так и для профилей плотности пучка и поля, причем отчетливо видна разность фаз между флуктуациями поперечной скорости пучка и флуктуациями профилей плотности и поля, составляющая около 90^o. На больших временах неустойчивость приводит к термализации пучка.

Итак, разработан трехмерный многопроцессорный гибридный код для описания астрофизической плазмы с точным сохранением нулевой дивергенции магнитного поля и выполнением законов сохранения энергии и импульса с точностью второго порядка по времени. Разработанный алгоритм включает метод Годунова с реконструкцией магнитного поля и решением задачи Римана, традиционно используемый в магнитогидродинамических кодах и впервые адаптированный для гибридного кода. В алгоритме не применяется традиционно используемый метод частиц конечного размера, что позволяет самосогласованно вычислять динамику электрического поля при перемещении частиц. Построенный код протестирован путем сравнения с одномерным аналогом и аналитическими результатами для упрощенного случая резонансной ион-ионной неустойчивости и может быть использован для моделирования бесстолкновительных процессов в астрофизической плазме.

Авторы выражают благодарность профессору А.М. Быкову за постановку задачи и неоценимую помощь в ее выполнении, а также Московскому и Санкт-Петербургскому отделениям МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов (кластер МВС-100К МСЦ РАН и кластер HP).

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (договор 11.G34.31.0001 с СПбГПУ и ведущим ученым Г.Г. Павловым), а также грантом РФФИ 11-02-00429 и Фондом Дмитрия Зимина «Династия».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Winske, D.** A nonspecialist's guide to kinetic simulations of space plasmas [Text] / D. Winske, N. Omidi // Journal of geophysical research.— Vol. 101.— A8.— 1996.— P. 12287–17303.

2. **Giacalone, J.** Charged-particle motion in multidimensional magnetic-field turbulence [Text] / J. Giacalone, J.R. Jokipii // Astrophys. Journ. 1994.— № 430.— P. 137–140.

3. **Jones, F.C.** Charged-particle motion in electromagnetic fields having at least one ignorable spatial coordinate [Text] / F.C. Jones, J.R. Jokipii, M.G. Baring // Astrophys. Journ.— 1998.— № 509.— P. 238–243.

4. **Winske, D.** Hybrid codes. Methods and applications. Computer space plasma physics: Simulation techniques and softwares [Text] / D. Winske, N. Omidi, edited by H. Matsumoto, Y. Omura // Tokyo: Terra Scientific, 1993.— P. 103–160.

5. **Filippychev, D.S.** Hybrid simulation of space plasmas: models with massless fluid representation of electrons. I. Collisionless shocks [Text] / D.S. Filippychev // Computational Mathematics and Modeling.— 2000.— Vol. 11.— № 1.— P. 15–39.

6. **Matthews, A.P.** Current advance method and cyclic leapfrog for 2D multispecies hybrid plasma simulations [Text] / A. P. Matthews// Journ. Comp. Phys.— 1994.— № 112. P. 102–116.

7. **Balsara, D.S.** Second-order-accurate schemes for magnetohydrodynamics with divergence-free reconstruction [Text] / D.S. Balsara // Astrophys. Journ. Suppl, Ser.— 2004.— № 151.— P. 149–184.

8. **Pritchett, P.L.** Particle-in-cell simulation of plasmas— a tutorial [Text] / P.L. Pritchett // Space plasma simulation: Proc. of the Sixth International School/ Symposium, ISSS-6, Garching, Germany, 3–7 September, 2001. Edited by J. Buchner, C.T. Dum, M. Scholer. Berlin: Schaltungsdienst Lange o.H.G.— 2001.— P. 1.

9. **Dawson, J.M.** Particle simulation of plasmas [Text] / J.M. Dawson // Rev. Mod. Physics.— 1983.— Vol. 55.— No. 2.— P. 403–447.

10. **Годунов, С.К.** Численное решение многомерных задач газовой динамики [Текст]/ С.К. Годунов.— М.: Наука, 1976.— 400 с.

11. **Gardiner T.A.** An unsplit Godunov method for ideal MHD via constrained transport [Электронный ресурс] / T.A. Gardiner, J.M. Stone // arxiv:astro-ph/0501557 v1. 25.01.2005

12. **Balsara, D.S.** Linearized formulation of the Riemann problem for adiabatic and isothermal magnetohydrodynamics [Text] / D.S. Balsara // Astrophys. Journ. Suppl Ser..— 1998— № 116.— P. 119–131.

13. **Воеводин, В.В.** Параллельные вычисления [Текст] / В.В. Воеводин, Вл. В. Воеводин.— СПб.: БХВ-Санкт-Петербург, 2002.— 608 с.

УДК 524.3-17, 524.354

А.М. Быков, П.Е. Гладилин,
С.М. Осипов, Г.Г. Павлов

НОВЫЙ КЛАСС ГАЛАКТИЧЕСКИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ИСТОЧНИКОВ КАК РЕЗУЛЬТАТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗВЕЗДНОГО ВЕТРА С ОСТАТКОМ СВЕРХНОВОЙ ЗВЕЗДЫ

Ударные волны (УВ) в космосе — одно из наиболее часто встречающихся явлений, поскольку такие волны обычно сопровождают процессы быстрого выделения энергии. Важную роль играют бесстолкновительные УВ, поскольку они позволяют ускорять заряженные частицы до ультрарелятивистских энергий. Формируемый спектр ускоренных частиц имеет, как правило, степенной вид. Ускорение на УВ способно передавать значительную долю энергии течения плазмы небольшой группе частиц [1]. УВ изолированных остатков сверхновых звезд относятся к наиболее вероятным источникам галактических космических лучей. Поскольку сверхновые, связанные с коллапсом массивной звезды, встречаются в звездных ассоциациях, возможны и более сложные конфигурации, чем изолированный остаток сверхновой.

Область, где фронт УВ расширяющегося остатка сверхновой звезды взаимодействует с быстрым и мощным звездным ветром от молодой массивной звезды (или звездного кластера) содержит сходящиеся магнитогидродинамические потоки (см. рисунок). Такие течения могут быть уникальными ускорителями релятивистских частиц с жесткими энергетическими спектрами в области максимальных энергий. Спектр частиц, ускоренных на определенных фазах эволюции системы, может быть существенно более жестким, чем спектры частиц, ускоренных одиночными УВ [2]. Источники излучения, связанные с данным классом объектов, должны быть наблюдаемы в диапазоне энергий свыше 1 ТэВ, где черенковские телескопы последнего поколения имеют достаточную чувствительность. Течение со сходящимися потоками может иметь место и в двойных системах со сталкивающимися звездными ветрами. Особое внимание привлекают двойные системы со звездами типа Вольфа — Райе, такие как WR140 [3, 4].

Модель ускорения заряженных частиц

Рассмотрим модель источника в окрестности звезды раннего спектрального класса *OB*-типа, обладающей мощным звездным ветром, и сближающейся с ней ударной волной от сверхновой с возрастом порядка тысячи лет.

Структура течения зависит от размера области сверхзвукового звездного ветра R_w (пк), который может быть определен по следующей формуле

$$R_w \approx 18{,}6 \left(\frac{u_{w3}^2 \dot{M}_{-7} t_6}{P_4^{is}} \right)^{1/3}, \qquad (1)$$

где u_{w3}, 10^3 км/с — скорость ветра; t_6, 10^6 лет — возраст звезды; $\dot{M}_{-7}$, 10^{-7} M_{sun}/год — скорость потери массы звездой с радиативным ветром (M_{sun} — масса Солнца); P_4^{is}, $10^4 \mathrm{K} \cdot \mathrm{см}^{-3}$ — давления в среде, окружающей звездный ветер.

Для типичных параметров ветра звезд ранних спектральных классов *O*9-*B*0 размер области ветра несколько превышает 10 пк. Сравнимый размер имеют оболочки сверхновых звезд с возрастом несколько тысяч лет. При этом скорость ударной волны сверхновой составляет 1000–3000 км/с.

Гидродинамическое моделирование взаимодействия остатков сверхновых со звездным ветром продемонстрировало основные свойства сходящихся потоков с ударными волнами [5]. В области, где взаимодействуют сразу два сближающихся фронта ударных волн, ускорение частиц будет иметь особый характер, отличающийся от стандартного процесса ускорения частиц на одиночной ударной волне. Такая область, по-видимому, является источником с более эффективным механизмом ускорения.

Рассмотрим одномерную кинетическую модель ускорения частиц при рассеянии на магнит-

ных полях двух встречных потоков с бесконечно тонкой областью между ними (упрощенная модель взаимодействия остатка сверхновой звезды и звездного ветра) без учета эффектов нелинейной обратной связи. Ускорение и распространение частиц в пространстве с коэффициентом диффузии $D(x,p)$ описывается уравнением переноса, или диффузионно-конвективным уравнением [6, 7]:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}D_i(x,p)\frac{\partial f_i}{\partial x}-u_i\frac{\partial f_i}{\partial x}+\frac{p}{3}\frac{\partial u_i}{\partial x}\frac{\partial f_i}{\partial p}+$$

$$+Q_0\delta(x)\delta(p-p_0)H(t), \qquad (2)$$

где f_i — функция распределения ускоряемых частиц, p — их импульс; p_0 — импульс непрерывно инжектируемых на фронте УВ частиц (начиная с момента $t=0$); Q_0 — мощность инжекции; δ —дельта-функция; $H(t)$ — стандартная ступенчатая функция Хевисайда; u_i — скорость потока; индексом i обозначены области различных потоков.

Потоки направлены вдоль оси x, т. е.

$$u_i=\begin{cases}u_1, & x<0;\\ -u_2, & x>0.\end{cases} \qquad (3)$$

Последнее слагаемое в уравнении (2) описывает источник частиц, инжектируемых в область ускорения. Здесь и далее индекс 1 относится к области $x<0$, индекс 2 — к области $x>0$.

Интегрируя уравнение (2) в пределах от $-\delta x$ до $+\delta x$ и устремляя δx к нулю, получим два граничных условия на фронте ударной волны:

$$f_1=f_2;$$

$$D_1\frac{\partial f_1}{\partial x}+\frac{u_1}{3}p\frac{\partial f_1}{\partial p}=$$

$$=D_2\frac{\partial f_2}{\partial x}-\frac{u_2}{3}p\frac{\partial f_2}{\partial p}+Q_0\delta(p-p_0)H(t). \qquad (4)$$

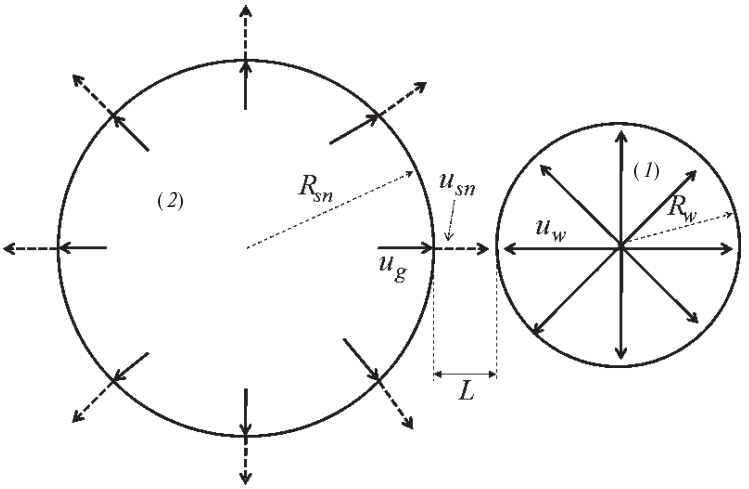
Если применить к уравнению (2) и граничным условиям (4) преобразование Лапласа, то можно получить нестационарное решение транспортного уравнения для области между сходящимися потоками:

$$f_i(x,p,t)=\frac{3Q_0p_0^3}{(u_1+u_2)p^3}H(p-p_0)H(t-\tau_a)\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{u_i}{D_i}|x|\right)\propto\frac{1}{p^3}, \qquad (5)$$

где τ_a — характерное время ускорения до импульса p, $H(x)$ — стандартная ступенчатая функция Хевисайда;

$$\tau_a=\int_{p_0}^{p}\frac{3}{(u_1+u_2)}\left(\frac{D_1}{u_1}+\frac{D_2}{u_2}\right)\frac{dp}{p}. \qquad (6)$$



Схематическое представление постановки задачи.

Окружности радиусов R_w и R_{sn} — фронты ударных волн (УВ) звездного ветра от звезды раннего спектрального класса (*1*) и остатка сверхновой звезды (*2*); стрелки — векторы скорости звездного ветра, скорости распространения УВ остатка сверхновой звезды и газа вблизи фронта УВ остатка сверхновой звезды (u_w, u_{sn}, u_g соответственно); L — расстояние между фронтами

Отсюда спектр ускоренных частиц будет иметь вид:

$$\frac{dN}{dp} \propto p^2 f \propto \frac{1}{p}. \qquad (7)$$

Таким образом, синхротронное излучение с энергиями порядка гига- и тераэлектроновольт может иметь очень жесткий спектр с показателем $\gamma \approx 1$. Полученный результат отличается от хорошо изученных случаев ускорения на одиночных ударных волнах с показателем $\gamma \approx 2$, т. е. данный механизм может позволить более эффективно преобразовывать кинетическую энергию ускоренных частиц в жесткое рентгеновское и гамма-излучение. Время ускорения τ_a в данном случае в $\left(\frac{u_1+u_2}{u_1-u_2}\right)$ раз меньше, чем для одиночной ударной волны.

Предложенный сценарий может объяснить происхождение некоторых наблюдаемых рентгеновских источников. Источники такого рода могут достаточно часто встречаться в регионах активного звездообразования. Например, область галактического центра может содержать много таких объектов, жесткое рентгеновское излучение которых можно наблюдать на наземных черенковских телескопах.

Обсуждение

Оценим характерные времена в системе, схематично представленной на рисунке. В этой системе УВ остатка сверхновой налетает со скоростью u_{sn} на стоячую ударную волну звездного ветра. Ускоренные частицы высокоэнергичной части спектра способны покидать предфронт УВ остатка, достаточно быстро пересекать область протяженностью L между УВ, где межзвездное магнитное поле B_{is} не усилено, и, следовательно, длина свободного пробега $\Lambda_{is}(p)$ ускоренных частиц в этой области много больше величины $\Lambda_f(p)$ — длины их свободного пробега вблизи фронтов УВ, и затем попадать в область звездного ветра. Таким образом, данные частицы будут рассеиваться на встречных гидродинамических потоках УВ остатка и звездного ветра.

Время, за которое УВ столкнутся и геометрия системы нарушится, оценим как

$$t_{appr} = \frac{L}{u_{sn}}. \qquad (8)$$

Время ускорения на встречных потоках высокоэнергичной доли частиц можно с помощью выражения (6) оценить как

$$t_a = \frac{3\left(\frac{D_{sn}}{u_g} + \frac{D_w}{u_w}\right)}{u_g + u_w} + \frac{L^2}{D_{is}}, \qquad (9)$$

где первое слагаемое соответствует времени ускорения на встречных потоках, а второе — времени диффузии ускоренной частицы в межзвездной среде между УВ; D_{sn}, D_w, D_{is} — коэффициенты диффузии ускоренных частиц вблизи фронтов УВ остатка сверхновой, звездного ветра и в межзвездной среде соответственно, u_w, u_g — скорости потоков звездного ветра и газа вблизи фронта УВ остатка соответственно. Коэффициенты диффузии связаны с длиной пробега следующим образом:

$$D = \frac{\Lambda(p,\mathbf{r})c}{3}, \qquad (10)$$

где $\mathbf{r}$ — пространственная координата.

Для эффективного ускорения частиц требуется, чтобы

$$t_a < t_{appr}. \qquad (11)$$

Перепишем это условие, используя выражения (8), (9):

$$\frac{3u_{sn}}{u_g + u_w}\left(\frac{D_{sn}}{Lu_g} + \frac{D_w}{Lu_w}\right) + \frac{Lu_{sn}}{D_{is}} < 1. \qquad (12)$$

Множитель при слагаемом в скобках имеет порядок нескольких единиц, обе величины в круглых скобках пропорциональны ширине предфронтов УВ. Для малости первого слагаемого в (12) расстояние между фронтами должно быть много больше ширины предфронтов; для малости второго требуется, чтобы $L << \frac{D_{is}}{u_{sn}}$. Оба условия могут быть удовлетворены, если $D_{is} >> D_{sn}$ и $D_{is} >> D_w$.

Радиусы остатка сверхновой и УВ звездного ветра имеют значения порядка 10 пк, расстояние между ударными волнами может быть порядка 1 пк для квазиплоской модели ускорения. Коэффициенты диффузии вблизи фронтов УВ предполагаем бомовскими, то есть длину пробега ускоренной частицы считаем равной ее гиро-

радиусу $\Lambda(p) = r_g = \frac{cp}{eB}$. Магнитное поле вблизи фронта УВ усилено до 100 мкГс, скорость газа вблизи фронта $u_g = 3000$ км/с, скорость звездного ветра $u_w = 1000$ км/с. Используя данные значения, получаем следующие оценки для частиц с энергий $\varepsilon = 10^{12}$ эВ:

$$\frac{D_{sn}}{u_g} = 10^{15}\,\text{см}\left(\frac{100\,\text{мкГс}}{B}\right)\times$$

$$\times\left(\frac{3000\,\text{км/с}}{u_g}\right)\left(\frac{\varepsilon}{10^{12}\,\text{эВ}}\right), \qquad (13)$$

$$\frac{D_w}{u_w} = 3\cdot 10^{15}\,\text{см}\left(\frac{100\,\text{мкГс}}{B}\right)\times$$

$$\times\left(\frac{1000\,\text{км/с}}{u_w}\right)\left(\frac{\varepsilon}{10^{12}\,\text{эВ}}\right). \qquad (14)$$

Видно, что они на три порядка меньше расстояния между УВ, что и необходимо для выполнения условия (12). Характерное значение межзвездного коэффициента диффузии оценим как

$$D_{is} = 3\cdot 10^{28}\,\text{см}^2/\text{с}\left(\frac{\varepsilon}{1\text{ГэВ}}\right)^{1/3}, \qquad (15)$$

откуда получаем для энергии частиц $\varepsilon = 10^{12}$ эВ значение отношения $\frac{D_{is}}{u_{sn}} \approx 10^{21}$ см (использовалось соотношение для сильной УВ $u_g \approx \frac{3}{4}u_{sn}$), что много больше расстояния между УВ, равного 1 пк. Таким образом, для рассмотренных параметров соотношение (12) выполняется.

Значение усиленного поля в 100 мкГс выбрано на основе теоретических работ по исследованию развития неустойчивостей и формирования спектров магнитных полей вблизи фронтов УВ в остатках сверхновых звезд (см. [7–10]). В частности, в работе [11] моделирование ускорения частиц в остатке сверхновой демонстрирует разумное согласие с наблюдениями при значении магнитного поля вблизи фронта УВ порядка 100 мкГс.

Механизм формирования жестких спектров ультрарелятивистских частиц и связанного с частицами излучения для условий, описанных выше, должен быть эффективен в течение времени порядка тысячи лет. Поскольку число остатков сверхновых данного возраста, имеющих звезду раннего спектрального класса в окрестности порядка 20 пк, невелико, можно ожидать наблюдения всего нескольких галактических источников такого типа. Перспективным следует считать источник в окрестности остатка сверхновой гамма-Лебедя. Рассмотренный новый класс источников является в определенном смысле промежуточным между компактными двойными типа WR 140 [3, 4] и сильно протяженными суперкавернами, связанными с множественными сверхновыми [12].

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (договор 11.G34.31.0001 с СПбГПУ и ведущим ученым Г.Г. -Павловым), а также грантом РФФИ 11-02-00429, часть расчетов в данной работе выполнена в суперкомпьютерных центрах президиума РАН и ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Malkov, M.A.** Nonlinear theory of diffusive acceleration of particles by shock waves [Text] / M.A. Malkov, L.O'C. Drury // Rep. Prog. Phys.— 2001.— Vol. 6.— P. 429–481.

2. **Bykov, A.M.** Energetic processes and nonthermal emission of starforming complexes [Text] // In: «Massive Stars and High-Energy Emission in OB Associations», Eds. G. Rauw, Y. Nazé, R. Blomme, E. Gosset.— 2005.— P. 95–98.

3. **Eichler**, **D.** Particle acceleration and nonthermal radio emission in binaries of early-type stars [Text] / D. Eichler, V. Usov // Astroph. Journal.— 1993.— Vol. 402— P. 271–279.

4. **Pittard, J.M.** Models of the non-thermal emission from early-type binaries [Text] / J.M. Pittard // High Energy Phenomena in Massive Stars. ASP Conference Series.— 2010.— Vol. 422.— P. 145–156.

5. **Velazques**, **P.F.** A supernova remnant collision with stellar wind [Text] / P.F. Velazques, G. Koenigsberger, A.C. Raga // Astroph. Journal.— 2003.— Vol. 584.— P. 284–292.

6. **Топтыгин**, **И.Н.** Космические лучи в межпланетных магнитных полях [Текст] / И.Н. Топтыгин.— М. Наука, 1983.— 302 с.

7. **Blandford**, **R.D.** Particle acceleration at astrophysical shocks— a theory of cosmic-ray origin [Text]

/ R.D. Blandford, D. Eichler // Phys. Reports.— 1987.— Vol. 154.— P. 1–210.

8. **Bell, A.R.** Turbulent amplification of magnetic field and diffusive shock acceleration of cosmic rays [Text] / A.R. Bell // Monthly Notices Royal Astronomical Society.— 2004.— Vol. 353.— P. 550–558.

9. **Bykov, A.M.** Cosmic ray current driven turbulence in shocks with efficient particle acceleration: The oblique, long-wavelength mode instability [Text] / A.M. Bykov, S.M.Osipov, D.C. Ellison // Monthly Notices Royal Astronomical Society.— 2011.— Vol. 410.— P. 39–52.

10. **Zirakashvili, V.N.** Diffusive shock acceleration with magnetic amplification by nonresonant streaming instability in supernova remnants [Text] / V.N. Zirakashvili, V.S. Ptuskin // Astroph. Journal.— 2008.— Vol. 678.— P. 939–949.

11. **Zirakashvili, V.N.** Nonthermal radiation of young supernova remnants: the case of RX J1713.7-3946 [Text] / V.N. Zirakashvili, F.A. Aharonian // Astroph. Journal.— 2010.— Vol. 708.— P. 965–980.

12. **Bykov, A.M.** Particle acceleration and nonthermal phenomena in superbubbles [Text] / A.M. Bykov // Space Science Reviews.— 2001.— Vol. 99.— P. 317–326.

ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 533.9

А.П. Головицкий

СЛАБОТОЧНЫЙ ТЛЕЮЩИЙ РАЗРЯД НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНЫХ ГАЗАХ

Тлеющий разряд в смеси инертных газов (ИГ) и галогенов при давлениях до 40 Торр используется как простой, мощный, эффективный и экологически безвредный источник ультрафиолетового (УФ) излучения, эмиттируемого образующимися в разряде эксимерными молекулами — галогенидами инертных газов. В работах [1, 2], а затем в исследованиях других авторов [3, 4] обнаружено существование двух стадий горения такого разряда в смеси ИГ и хлора. Сразу после пробоя возникала слаботочная стадия, характеризуемая малым током (до 3 мА), большим падением напряжения на разряде (до 5 — 9 кВ в зависимости от содержания хлора при длине разряда 15 — 20 см и диаметре трубки 1 — 2 см) и очень слабым видимым свечением. Удельная мощность УФ излучения, однако, могла достигать 0,1 Вт/см^3. Повышение напряжения источника приводило к скачкообразному переходу разряда в другую, сильноточную стадию, для которой характерны гораздо больший ток (на порядок величины), понижение напряжения на разряде в 1,5 — 3 раза и значительное возрастание как видимого, так и УФ излучения разряда.

Слаботочная стадия характеризуется особенно большими значениями кпд выхода УФ излучения: до 30 % [5, 6], что ценно для практических применений. К сожалению, до сих пор неясны физические причины как существования слаботочного разряда в электроотрицательных (ЭО) газах, так и перехода его в сильноточный. Хотя в работах [1, 2] было высказано предположение, что за переход в сильную стадию ответствен механизм ступенчатой ионизации метастабильных атомов ИГ, однако в дальнейшем эта гипотеза не подтвердилась: после моделирования разряда [6, 7] выяснилось, что при малых токах концентрация этих атомов слишком мала для эффективного протекания ступенчатой ионизации.

Энергетическим характеристикам слаботочной стадии разряда в смесях ИГ с галогенами была посвящена статья [5]. И хотя физический механизм существования слаботочной стадии авторами не обсуждался, там предлагалось назвать ее «поднормальным разрядом» — по аналогии с названной так переходной стадией от таунсендовского к нормальному тлеющему разряду в электроположительных (ЭП) газах [8]. Однако известно, что в поднормальном разряде в этих газах концентрации заряженных частиц настолько малы, что пространственный заряд почти не влияет на их движение, при этом плотность тока разряда не превышает долей мкА/см^2. В слаботочной же стадии разряда в ЭО газах плотность тока на три порядка больше и влияние пространственного заряда должно быть существенным.

В работах [6, 9] была предложена модель тлеющего разряда в смесях ИГ с галогенами, обеспечивающая количественную точность расчетов. Было, в частности, показано, что одним из главных факторов, влияющих как на свойства плазмы разряда, так и на энергетические характеристики УФ эксимерного излучения, является диссоциация молекул галогена электронным ударом. Однако анализу слабой стадии ЭО разряда в этих публикациях было уделено лишь незначительное внимание, ее свойства не были подробно проанализированы.

На рис. 1 сопоставлены результаты наших расчетов радиальных распределений заряженных частиц по модели [9] для смеси 6 Торр ксенона и 0,25 Торр хлора при радиусе разрядной

трубки $R = 6$ мм и значениях токов 10 мА (соответствует сильной стадии) и 2 мА (соответствует слабой стадии). Видно, что на обеих стадиях плазма в радиальном направлении расслоена. Имеются внутренняя сердцевина ион-ионной плазмы (в ней концентрация электронов гораздо меньше, чем ионов, и имеет место практически свободная диффузия электронов) и пристеночный слой электроположительной (ЭП) плазмы, где концентрации электронов и положительных ионов соизмеримы, а их уход на стенку идет по амбиполярному механизму — в соответствии с результатами теоретических и расчетных работ, посвященных плазме ЭО разрядов [10–13]. Качественных различий в распределениях у слабой и сильной стадий здесь не наблюдается; есть только количественные: на сильной стадии концентрация электронов в объеме плазмы намного больше, а область слоя ЭП плазмы глубже простирается от стенки в объем, чем на слабой стадии.

Поскольку в модели работы [9] предполагалась квазинейтральность, то надлежит выяснить масштаб ее нарушения в пристеночной области и справедливость допущения об амбиполярности диффузии в слое ЭП плазмы на слабой стадии.

Оценка величины дебаевской длины r_D (характерного масштаба нарушения квазинейтральности)

$$r_D = \sqrt{\frac{kT_e}{4\pi n_e e^2}}$$

(где T_e — температура электронов) на слабой стадии при токе 2 мА, концентрации электронов $n_e \approx 2\cdot 10^9$ см$^{-3}$ и $T_e \approx 1$ эВ [6] дает значение $r_D \approx$

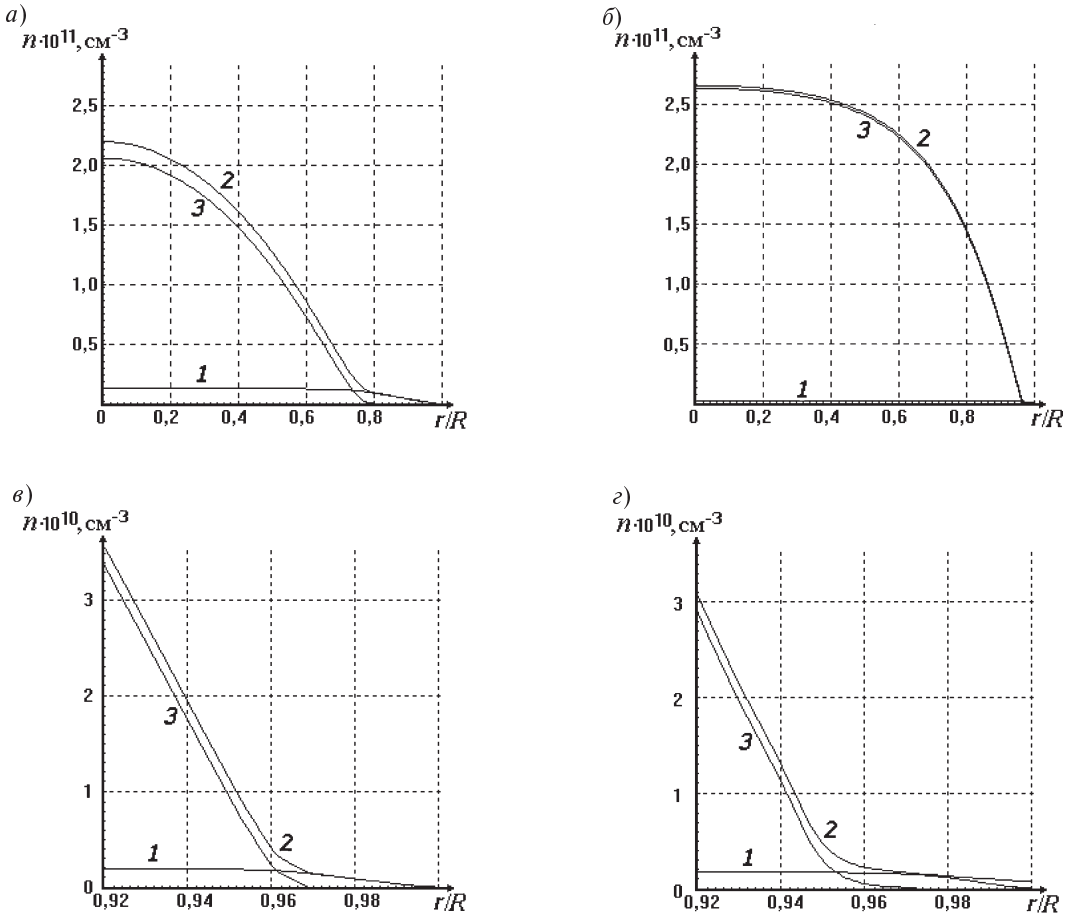


Рис. 1. Радиальные распределения концентрации заряженных частиц в плазме разряда в газовой смеси 6 Торр Xe и 0,25 Торр Cl_2, радиус трубки 6 мм, на сильной (*а*) и слабой (*б – г*) стадиях с токами разряда, мА: 10 (*а*) и 2 (*б – г*); *в, г* – фрагменты зависимости, приведенной на рис. 1, *б*;
1 – электроны, *2, 3* – положительные и отрицательные ионы соответственно; расчеты выполнены по стационарной [9] (*а – в*) и эволюционной [7] (*г*) моделям

$\approx 1\cdot10^{-2}$ см. Оно сравнимо с толщиной пристеночного слоя ЭП плазмы в этих условиях — $2{,}5\cdot10^{-2}$ см (см. рис. 1, *в*, *г*). Если бы длина r_D превосходила эту толщину, то электроны диффундировали бы на стенку свободно и тогда название «поднормальный», действительно, адекватно отражало бы физику слабой стадии.

Более точные расчеты были проделаны при помощи модели [7], которая по идее сходна с эволюционной моделью, развитой в [13]. При этом квазинейтральность заранее не постулировалась, а решение получалось как результат моделирования эволюции ЭО плазмы во времени от некоего стартового (вообще говоря, произвольного) состояния к стационарному устойчивому состоянию. Правда, в отличие от модели, описанной в [6, 9], в работе [7] не учитывалась диссоциация молекул галогена электронным ударом, но (как было показано в [6, 9]) на слабой стадии она мала, и все результаты, даваемые обеими моделями, близки. На рис. 1, *в*, *г* приведены распределения концентраций заряженных частиц плазмы, рассчитанные по обеим моделям. Видно, что область нарушения квазинейтральности в действительности мала и затрагивает не весь слой ЭП плазмы, а лишь его внешнюю часть. На тот факт, что данное нарушение в плазме ЭО газов и по величине, и по пространственному масштабу намного слабее, чем в плазмах ЭП газов, указано в работе [14].

Итак, диффузионный уход электронов на стенку в слаботочной стадии все же остается амбиполярным. Но в плазме ЭО газов диффузия не является единственным механизмом гибели

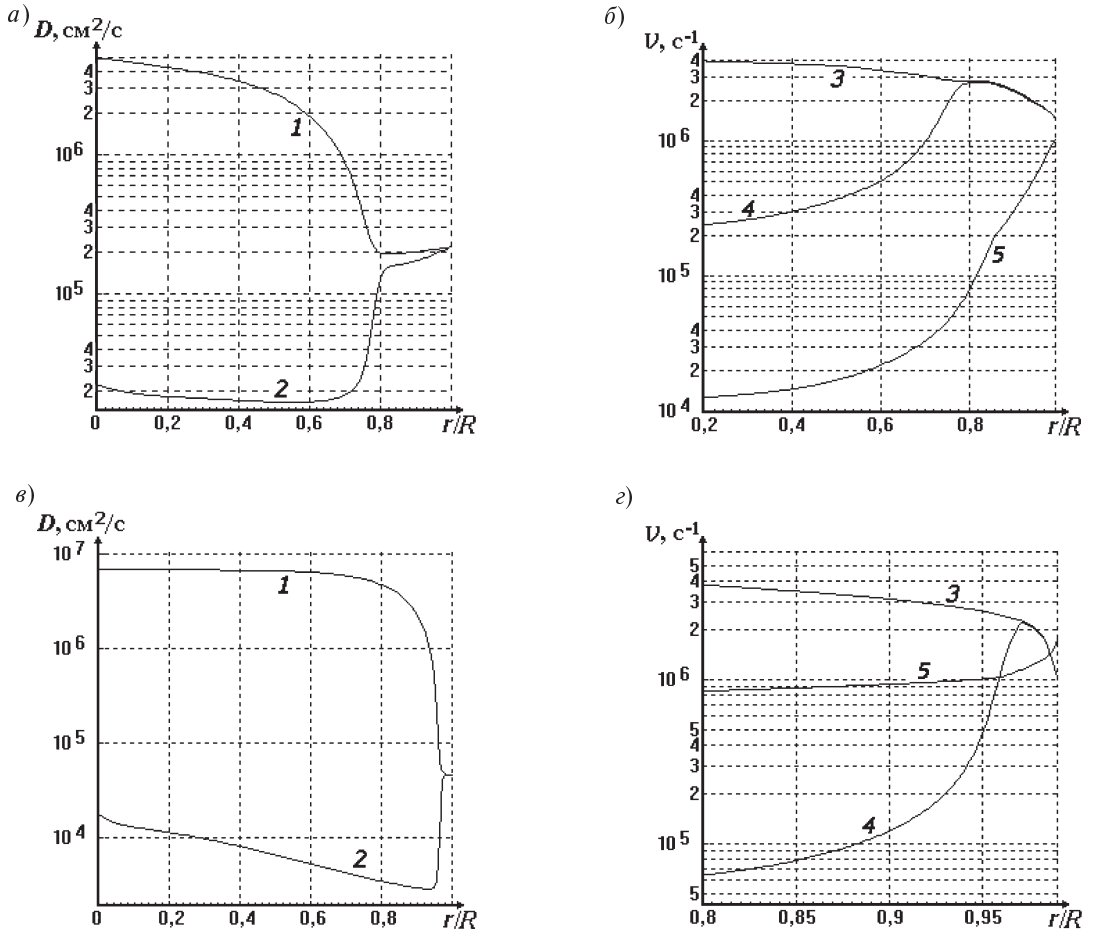


Рис. 2. Радиальные профили эффективных коэффициентов диффузии (*а*, *в*) и частот гибели заряженных частиц (*б*, *г*) в разряде при напуске 6 Торр Xe и 0,25 Торр Cl_2, радиус трубки 6 мм:
а, *б* — ток 10 мА (сильная стадия), *в*, *г* — ток 2 мА (слабая стадия);
1 — D_{ae}, *2* — D_{ap}, *3* — ν_{D_e}, *4* — ν_{D_p}, *5* — ν_a

электронов. В данной работе по описанной в статье [9] модели нами рассчитаны радиальные распределения частот доминирующих процессов гибели заряженных частиц в пристеночной области изучаемых разрядов: ν_a — прилипания электронов к молекулам хлора, а также ν_{D_e}, ν_{D_p} —диффузионного устранения электронов и положительных ионов соответственно. Величины ν_{D_e} и ν_{D_p} вычислялись как

$$\nu_{D_j} = \frac{1}{n_j r}\frac{d}{dr}(r\Gamma_j),$$

где индексы j соответствуют электронам (e) или положительным ионам (p), n_j — концентрации заряженных частиц j-го сорта, а Γ_j — их потоки в радиальном направлении.

Результаты расчетов для сильной и слабой стадий разряда показаны на рис. 2 наряду с рассчитанными отдельно для электронов и положительных ионов радиальными зависимостями эффективных коэффициентов диффузии D_{ae} и D_{ap} (рис. 2, *а*, *в*). Последние рассчитывались как

$$D_{aj} = -\frac{\Gamma_j \tilde{T}_j}{d\left(n_j \tilde{T}_j\right)/dr}.$$

Для случая двухкомпонентной плазмы разряда в ЭП газах при малых градиентах температур величины D_{ae} и D_{ap} совпали бы повсюду в плазме и соответствовали бы коэффициенту амбиполярной диффузии D_a. В исследуемом разряде в ЭО газах отрицательные ионы отсутствуют только в узкой пристеночной области плазмы (см. рис. 1, *а*, *б*: при $r/R > 0{,}8$ для 10 мА и $r/R > 0{,}96$ для 2 мА). В ней действительно наблюдается сближение значений D_{ae} и D_{ap} к определенной величине D_a (см. рис. 2, *а*, *в*). Наличие амбиполярной диффузии в пристеночных областях плазмы ЭО газов теоретически предсказано в статьях [10, 11]. Однако в остальном объеме плазмы выполняется неравенство $D_{ap} < D_{ae}$ (см. рис. 2, *а*, *в*), причем его строгость возрастает при снижении разрядного тока из-за увеличения электроотрицательности разряда, вызванного уменьшением степени диссоциации молекул хлора электронным ударом (как показано в [9]).

Из рис. 2, *б*, *г* видно, что между сильной и слабой стадиями наблюдается качественное различие. Если на сильной значение ν_{D_e} у стенки превосходит таковое для ν_a, то на слабой стадии наоборот: величина ν_a на периферии делается больше величины ν_{D_e}, т. е. в этом случае прилипание является основным процессом ухода электронов из разряда. Дело в том, что при малых токах концентрация молекул хлора максимальна, так как слабы и диссоциация молекул хлора электронным ударом (мала концентрация n_e), и термодиссоциация, поскольку температура газа близка к комнатной [5, 15].

При принудительном увеличении тока разряда концентрация молекул хлора станет убывать из-за роста скорости их диссоциации электронным ударом и увеличивающегося термовытеснения; при этом частота прилипания спадет, что должно вызвать дополнительный прирост величины n_e, возрастание диссоциации электронным ударом, дальнейшее ослабление прилипания и т. д. Этот процесс будет развиваться до тех пор, пока уход электронов из разряда не станет определяться диффузионным устранением (см. рис. 2, *б*). Тогда он остановится, поскольку частота диффузионного (амбиполярного у стенки) устранения гораздо слабее зависит от тока и от концентрации электронов, чем частота прилипания. Ослабление скорости гибели электронов с одновременным возрастанием их концентрации в итоге переведет разряд в сильноточную стадию.

Изложенный механизм позволяет понять как наблюденный в эксперименте факт существования двух различных стадий разряда — слаботочной и сильноточной, так и неустойчивость перехода между ними.

Следует отметить, что аналогия с переходом от поднормального к нормальному режиму разряда в ЭП газах — чисто внешняя. В ЭП разряде рост тока и концентраций заряженных частиц ведет к возрастанию пространственного заряда в плазме, ввиду чего скорость диффузионной гибели (только она там и присутствует) снижается от почти свободной в поднормальном до амбиполярной в нормальном режиме [8]. Что же касается ЭО разрядов, то переход от слабой к сильной стадии вызван не ослаблением скорости диффузионного устранения электронов (оно как было, так и осталось амбиполярным), а ослаблением скорости их общей гибели из-за уменьшения скорости их прилипания, вызванного диссоциацией молекул галогена электронным ударом.

Таким образом, использование термина «поднормальный разряд» для слаботочной стадии раз-

ряда в ЭО газах следует признать не вполне корректным: физические механизмы существования этих разрядов сильно различаются. Диапазоны плотностей токов отличаются между собой на три порядка; в поднормальном разряде имеет место баланс между ударной ионизацией и близкой к свободной диффузией. В слаботочной же стадии разряда в ЭО газах баланс поддерживается ионизацией и прилипанием. Относительно слабый диффузионный уход частиц (амбиполярный) все же должен происходить и в слаботочной стадии, так как для поддержания разряда требуется ионизация, а значит, обязательно наличие некоторого количества свободных, «неприлипших» электронов, которые и уходить из плазмы должны свободными — т. е. посредством диффузии.

Итак, главное различие слаботочной и сильноточной стадий разряда в ЭО газах заключается в том, что среди механизмов ухода электронов из пристеночной области разряда на слаботочной доминирует прилипание электронов к молекулам ЭО газа, а на сильноточной — амбиполярная диффузия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Головицкий, А.П.** Характеристики ультрафиолетового эксимерного излучения непрерывного тлеющего разряда низкого давления [Текст] / А.П. Головицкий, С.Н. Кан // Оптика и спектроскопия.— 1993.— Т. 75.— № 3.— С. 604–609.

2. **Golovitski, A.** Incoherent UV light emission from low pressure glow discharges in rare gas — halogen mixtures [Text] / A. Golovitski, S. Kan // Proc. of the ICPIG XX, Bochum, Germany.— 1993.— P. 619–620.

3. **Панченко, А.Н.** Мощные коаксиальные эксилампы со средней мощностью более 100 Вт [Текст] / А.Н. Панченко, В.С. Скакун, Э.А. Соснин Э.А. [и др.] // Письма в ЖТФ.— 1995.— Т. 21.— № 20.— С. 77–80.

4. **Ломаев, М.И.** Мощные источники спонтанного УФ излучения с накачкой импульсными и непрерывными разрядами [Текст] / М.И. Ломаев, А.Н. Панченко, В.С. Скакун [и др.] // Оптика атмосферы и океана.— 1996.– Т. 9.— № 2.— С. 199–206.

5. **Панченко, А.Н.** Излучательные характеристики поднормального тлеющего разряда в смесях инертных газов и галогенов [Текст] / А.Н. Панченко, В.Ф. Тарасенко // Оптика и спектроскопия.— 1998.— Т. 84.— № 3.— С. 389–392.

6. **Головицкий, А.П.** Моделирование газоразрядных источников ультрафиолетового излучения с тлеющим разрядом в смеси ксенона и хлора [Текст] / А.П. Головицкий // ЖТФ.— 2011.— Т. 81.— Вып. 3.— С. 55–64.

7. **Габов, А.А.** Моделирование разряда низкого давления в электроотрицательных газах с учетом радиальной неоднородности плазмохимических процессов [Текст] / А.А. Габов, А.П. Головицкий / / Труды X Всеросс. конф. по физике газового разряда ФГР-2000.— Рязань, 2000.— С. 206–209.

8. **Райзер, Ю.П.** Физика газового разряда [Текст] / Ю.П. Райзер.— М.: Наука, 1987.— 592 с.

9. **Головицкий, А.П.** Моделирование положительного столба тлеющего разряда в смеси инертных газов и хлора с учетом диссоциации молекул хлора [Текст] / А.П. Головицкий // ЖТФ.— 2011.— Т. 81.— Вып. 3.— С. 45–54.

10. **Цендин, Л.Д.** Диффузия заряженных частиц в плазме электроотрицательных газов [Текст] / Л.Д. Цендин // ЖТФ.— 1985.— Т. 55.— Вып. 12.— С. 2318–2322.

11. **Цендин, Л.Д.** Расслоение газоразрядной плазмы в электроотрицательных газах [Текст] / Л.Д. Цендин // ЖТФ.— 1989.— Т. 59.— Вып. 1.— С. 21–28.

12. **Franklin, R.N.** The recombination-dominated positive column with finite ion temperature [Text] / R.N. Franklin, J. Snell // J. Phys. D: Appl. Phys.— 1994.— Vol. 27— P. 2102–2106.

13. **Volynets, V.N.** Experimental and theoretical study of the CF_4 DC glow discharge positive column [Text] / V.N. Volynets, A.V. Lukyanova, A.T. Rakhimov [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys.— 1993.— Vol. 26.— P. 647–656.

14. **Franklin, R.N.** The low-pressure positive column in electronegative gases including space charge-matching plasma and sheats [Text] / R.N. Franklin, J. Snell // J. Phys. D: Appl. Phys.— 1998.— Vol. 31.— P. 2532–2542.

15. **Головицкий, А.П.** Радиальные распределения плазменно-оптических характеристик эксимерных ультрафиолетовых излучателей тлеющего разряда в смеси Xe + Cl_2 [Текст] / А.П. Головицкий, С.В. Лебедев // Оптика и спектроскопия.— 1997.— Т. 82.— № 2.— С. 251–255.

УДК 621.822.171-251

Нгуен Ван Тханг

СИЛЫ И МОМЕНТЫ, ДЕЙСТВУЮЩИЕ НА РОТОР В УПОРНОМ ПОДШИПНИКЕ СКОЛЬЖЕНИЯ, С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИКИ СМАЗКИ И ЦЕНТРОБЕЖНЫХ СИЛ

В рамках классической теории короткого подшипника обычно рассматривается твердый вращающийся вал (ротор) внутри гнезда, которое фиксировано в пространстве. Зазор между твердыми телами заполнен несжимаемым маслом [2, 4]. В данной статье исследуется базовый случай (рис. 1, *а*): несжимаемое масло находится в зазоре между цилиндром, вращающимся с угловой скоростью ω_2, причем его ось вращения фиксирована в пространстве, и вращающимся плавающим валом (ротором, угловая скорость ω_1).

Динамике роторов в подшипниках скольжения посвящена обширная литература, но все они используют обычное уравнение для течения масла в зазоре (т. е. уравнение Рейнольдса) без центробежных сил. В связи с этим в таких работах рассматривается движение ротора либо с учетом только гидродинамических сил [2, 6] либо гидродинамических сил и сил трения [5].

Цель настоящей работы — анализ выражений для сил и моментов в этом случае при учете центробежных сил, влиянием которых нельзя пренебрегать при быстром вращении ротора ($\omega_1 >> \omega_2$, $n_1 \sim 10^5$ об/с) [3]. Далее, на базе полученного результата предполагается исследовать более сложный случай упорного подшипника скольжения, который состоит из трех частей (рис. 1, *б*): фиксированный цилиндр (гнездо) *2*, плавающий цилиндр (твердое кольцо) *3*, вращающийся с угловой скоростью ω_2, и плавающий вал (ротор) *1*, вращающийся со скоростью ω_1. Зазоры между твердыми телами заполнены несжимаемым маслом *4*.

Аналитическая зависимость давления от положения ротора в зазоре получается из решения гидродинамического уравнения для течения масла в зазоре (уравнение Рейнольдса). Имея в распоряжении решение из теории короткого подшипника, можно получить выражения для сил

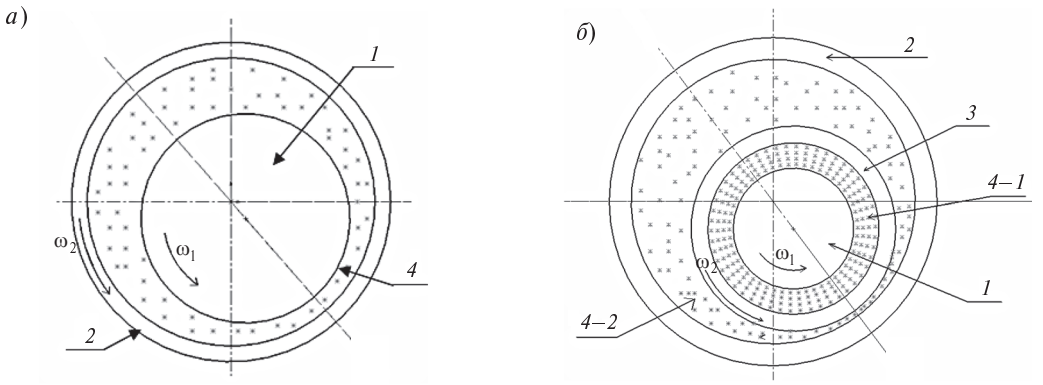


Рис. 1. Схематическое представление упорных подшипников скольжения: *а* — с двумя цилиндрами, *б* — с тремя цилиндрами;

1 — плавающий ротор; *2* — фиксированный цилиндр; *3* — плавающяя втулка (кольцо); *4* — несжимаемое масло (*4–1* — внутреннее поле, *4–2* — внешнее поле); ω_1, ω_2 — угловые скорости вращения элементов *1* и *2*

и моментов: силы, действующие на ротор, определяются путем интегрирования функции распределения давления по поверхности ротора, а моменты, действующие на ротор, доставляются интегрированием касательного напряжения $\tau_{r\varphi}$ (в цилиндрической системе координат) по этой поверхности.

Основная трудность задачи заключается в том, что необходимо установить аналитическую зависимость сил и моментов, действующих на ротор, от положения ротора в зазоре. С указанной целью необходимо исследовать течение масла в зазоре, а для этого требуется обобщить гидродинамическую теорию смазки на случай значительных центробежных сил. Отдельно будет исследован случай короткого подшипника.

Скорость и давление смазки в зазоре упорных подшипников скольжения

Движение смазки в зазоре упорного подшипника скольжения определяется уравнением равновесия для количества движения [1]:

$$\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}-\rho\dot{\mathbf{v}}=0, \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{\tau}$ — тензор напряжения, ρ — плотность.

Скорость $\mathbf{v}$ и оператор Гамильтона ∇ в цилиндрической системе координат имеют вид:

$$\mathbf{v}=\mathbf{e}_r u+\mathbf{e}_\varphi v+\mathbf{e}_z w;$$

$$\nabla=\mathbf{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\mathbf{e}_\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathbf{e}_z\frac{\partial}{\partial z}. \qquad (2)$$

Смазка в зазоре упорного подшипника скольжения принимается несжимаемой жидкостью (ньютоновская жидкость) [1]:

$$\boldsymbol{\tau}=-p\mathbf{E}+\mathbf{s},\quad \mathbf{s}=2\mu(\nabla\mathbf{v})^s,\quad p\ge 0, \qquad (3)$$

где p — давление смазки в зазоре, $\mathbf{s}$ — девиатор тензора напряжения $\boldsymbol{\tau}$, μ — динамическая вязкость.

Рассмотрим стационарную задачу, тогда из уравнения непрерывности материала получим:

$$\dot{\mathbf{v}}=\frac{d\mathbf{v}}{dt}=\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}+\mathbf{v}\left(\nabla\mathbf{v}\right)=\mathbf{v}\left(\nabla\mathbf{v}\right). \qquad (4)$$

Подставив формулы (2), (3) и (4) в уравнение баланса количества движения (1), получим окончательное уравнение —Навье — Стокса в цилиндрических координатах:

$$\mathbf{e}_r\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial r}-p\right)+\frac{\mu}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\varphi}-\frac{v}{r}\right)+\right.$$

$$+\mu\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial z}\right)-\frac{2\mu}{r^2}\left(\frac{\partial v}{\partial\varphi}+u\right)+$$

$$\left.+\frac{p}{r}+\frac{2\mu}{r}\frac{\partial u}{\partial r}-\frac{p}{r}-\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{v}{r}\left(\frac{\partial u}{\partial\varphi}-v\right)+w\frac{\partial u}{\partial z}\right)\right]+$$

$$+\mathbf{e}_\varphi\left[\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial u}{\partial\varphi}-v\right)\right)+\right.$$

$$+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(2\mu\frac{1}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial\varphi}+u\right)-p\right)+2\mu\frac{1}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial u}{\partial\varphi}-v\right)\right)+$$

$$\left.+\mu\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial\varphi}+\frac{\partial v}{\partial z}\right)-\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{v}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial\varphi}+u\right)+w\frac{\partial v}{\partial z}\right)\right]+$$

$$+\mathbf{e}_z\left[\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial z}\right)+\mu\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial\varphi}+\frac{\partial v}{\partial z}\right)+\right.$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(2\mu\frac{\partial w}{\partial z}-p\right)+\mu\frac{1}{r}\left(\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial z}\right)-$$

$$\left.-\rho\left(u\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{v}{r}\frac{\partial w}{\partial\varphi}+w\frac{\partial w}{\partial z}\right)\right]=0. \qquad (5)$$

Это векторное уравнение равносильно трем скалярным уравнениям, т. е. каждое выражение в квадратных скобках равно нулю. В результате имеем три уравнения для изменения давления p по направлениям $\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_z$:

$$\frac{\partial p}{\partial r}=\ldots,\quad\frac{\partial p}{\partial\varphi}=\ldots,\quad\frac{\partial p}{\partial z}=\ldots.$$

Предполагается ламинарное течение в зазоре; тогда радиальным компонентом u скорости можно пренебречь, по сравнению с другими компонентами. Рассмотрим очень узкий зазор; тогда скорость масла в нем очень быстро изменяется. Поэтому зависимости вектора скорости $\mathbf{v}$ от φ, z очень слабы, то есть

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\ll\frac{\partial}{\partial r};\quad\frac{\partial}{\partial z}\ll\frac{\partial}{\partial r}.$$

В силу этого приближения три скалярных уравнения (5) заметно упрощаются [3], а именно

$$\mathbf{e}_r:\ \frac{\partial p}{\partial r}=\rho\frac{v^2}{r}; \qquad (6)$$

$$\mathbf{e}_\varphi:\ \frac{1}{\mu}\frac{\partial p}{\partial\varphi}=\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v}{\partial r}\right)-\frac{v}{r}; \qquad (7)$$

$$\mathbf{e}_z:\ \frac{1}{\mu}\frac{\partial p}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial w}{\partial r}\right). \qquad (8)$$

Течение в зазоре

Рассмотрим базовый случай: течение несжимаемого масла в зазоре, который ограничен вращающимся цилиндром с фиксированной осью и вращающимся плавающим ротором. Граничные условия имеют вид

$$r=R:\ u_0=0,\ v_0=R\omega_2,\ w_0=0;$$

$$r=R-h_0:\ u_0=-\dot{h}_0,\ v_0=(R-h_0)\omega_1,\ w_0=0, \qquad (9)$$

где h_0 — ширина зазора; ω_2, R — угловая скорость и внутренний радиус вращающегося цилиндра; ω_1, r_0 — угловая скорость и внешний радиус вращающегося плавающего ротора. Интегрирование уравнения (6) дает формулу

$$p_0=\int\rho\frac{v_0^2}{r}dr+P_0(\varphi,z). \qquad (10)$$

Интегрируя уравнение (7), получаем

$$v_0=\frac{1}{4}\frac{1}{\mu}\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}r\left(2\ln r-1\right)+D_{01}r+\frac{D_{02}}{r}. \qquad (11)$$

Интегральные константы D_{01}, D_{02} можно определить с помощью граничных условий (9) для v_0. В результате имеем выражение

$$v_0=\frac{1}{4}\frac{1}{\mu}\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}f_{0v}(r)+g_{0v}(r), \qquad (12)$$

где

$$\begin{cases} f_{0v}(r)=2\dfrac{A}{r\left[R^2-\left(R-h_0\right)^2\right]}; \\ g_{0v}(r)=\dfrac{\omega_2R^2\left[r^2-\left(R-h_0\right)^2\right]+\omega_1\left(R-h_0\right)^2\left[R^2-r^2\right]}{r\left[R^2-\left(R-h_0\right)^2\right]}; \end{cases}$$

$$A=r^2R^2\ln\left(\frac{r}{R}\right)+r^2\left(R-h_0\right)^2\ln\left(\frac{R-h_0}{r}\right)+$$

$$+R^2\left(R-h_0\right)^2\ln\left(\frac{R}{R-h_0}\right).$$

Аналогично интегрируя уравнение (8), получим выражение для $w_0(r)$:

$$w_0=\frac{1}{4}\frac{1}{\mu}\frac{\partial P_0}{\partial z}f_{0w}(r), \qquad (14)$$

где

$$f_{0w}(r)=r^2+\frac{\left(R-h_0\right)^2\ln\left(\frac{r}{R}\right)+R^2\ln\left(\frac{R-h_0}{r}\right)}{\ln\left(\frac{R}{R-h_0}\right)}. \qquad (15)$$

Для радиальной компоненты скорости $u_0(r)$ принимается линейная зависимость, удовлетворяющая граничному условию (9):

$$u_0(r)=-\frac{\dot{h}_0}{h_0}\left(R-r\right). \qquad (16)$$

Уравнение неразрывности и уравнение Рейнольдса

Уравнение неразрывности для любой жидкости с плотностью ρ имеет вид:

$$\dot{\rho}=0; \qquad (17)$$

$$\Leftrightarrow\dot{\rho}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\mathbf{v}\rho\right)=0.$$

Для несжимаемой жидкости ($\rho=\text{const}$) уравнение неразрывности упрощается:

$$\nabla\cdot\mathbf{v}=0. \qquad (18)$$

В цилиндрической системе координат оно выглядит следующим образом [1]:

$$\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial\varphi}+\frac{\partial w}{\partial z}+\frac{u}{r}=0. \qquad (19)$$

Интегрируем локальное уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости (18) в ограниченном объеме, то есть рассматриваем зазор $r_0\le r\le r_0+h_0$:

$$\int\limits_{V(t)}\nabla\cdot\mathbf{v}dV=\int\limits_{\partial V(t)}\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}dS=0. \qquad (20)$$

Эта формула показывает, что суммарный расход через определенный ограниченный объем равен нулю [1]. Рассмотрим элементарный объем в цилиндрической системе координат, ограниченный рассматриваемым зазором:

$$Q_{0r}+Q_{0\varphi}+Q_{0z}=0, \qquad (21)$$

где $Q_{0r}, Q_{0\varphi}, Q_{0z}$ — соответственно расходы через грани элементарного объема по нормальным направлениям $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\varphi$, $\mathbf{e}_z$, а Q_{0r} — расход через площадки $Rd\varphi dz$ и $(R-h_0)d\varphi dz$ [3];

$$Q_{0r}=\left(\left[\mathbf{v}_0(R)\right]Rd\varphi dz-\right.$$

$$-\left[\mathbf{v}_0(R-h_0)\right](R-h_0)d\varphi dz\Big)\cdot\mathbf{e}_r\approx$$

$$\approx\Big(\left[u_0(R)\right]R-\left[u_0(R-h_0)\right](R-h_0)\Big)d\varphi dz. \quad (22)$$

Приняв линейное приближение (16) для радиальной скорости, а именно

$$u_0(R)=0,\ u_0(R-h_0)=-\frac{\partial h_0}{\partial t},$$

мы получаем выражение для Q_{0r}:

$$Q_{0r}=\left(R-h_0\right)\frac{\partial h}{\partial t}d\varphi dz. \quad (23)$$

Интегрируем равенство (21) по высоте зазора, т. е. вычисляем интеграл $\int\limits_{R-h_0}^{R} dr$. Тогда получаем интегральное уравнение непрерывности для несжимаемой жидкости в ограниченном объеме, то есть в зазоре $R-h_0\le r\le R$ [3]:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}q_{0\varphi}+\frac{\partial}{\partial z}q_{0z}+\frac{R-h_0}{R}\frac{\partial h_0}{\partial t}=0, \quad (24)$$

где

$$q_{0\varphi}=\int\limits_{R-h_0(\varphi)}^{R}v_0\,dr;\ \ q_{0z}=\int\limits_{R-h_0(\varphi)}^{R}w_0\frac{r}{R}dr. \quad (25)$$

Чтобы вычислить интегралы в формуле (25), мы пользуемся формулами (12), (14):

$$q_{0\varphi}=\frac{1}{4}\frac{1}{\mu}\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}F_{0v}(h_0)+G_{0v}(h_0);$$

$$q_{0z}=\frac{1}{4}\frac{1}{\mu}\frac{\partial P_0}{\partial z}F_{0w}(h_0),$$

где

$$F_{0v}(h_0)=\int\limits_{R-h_0(\varphi)}^{R}f_{0v}(r)\,dr;$$

$$G_{0v}(h_0)=\int\limits_{R-h_0(\varphi)}^{R}g_{0v}(r)\,dr;$$

$$F_{0w}(h_0)=\int\limits_{R-h_0(\varphi)}^{R}\frac{r}{R}f_{0w}(r)\,dr.$$

Подставив эти формулы в уравнение непрерывности (24), мы приходим к новому уравнению Рейнольдса для случая значительных центробежных сил:

$$\frac{1}{4}\frac{\partial^2P_0}{\partial z^2}F_{0w}(h_0)+$$

$$+\frac{1}{4}\frac{1}{R}\left[\frac{\partial^2P_0}{\partial\varphi^2}F_{0v}(h_0)+\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}\frac{\partial F_{0v}(h_0)}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial\varphi}\right]=$$

$$=-\frac{\mu}{R}\left[\left(R-h_0\right)\frac{\partial h_0}{\partial t}+\frac{\partial G_{0v}(h_0)}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial\varphi}\right]. \quad (26)$$

В результате разложения $F_{0w}(h_0)$, $F_{0v}(h_0)$ и $G_{0v}(h_0)$ в ряд Тейлора по переменным h_0 в точке $h_0=0$ получим уравнение Рейнольдса для случая значительных центробежных сил (26) в другом виде:

$$\frac{h_0^3}{6}\frac{\partial^2P_0}{\partial z^2}+\frac{h_0^3}{6}\frac{1}{R^2}\left[\frac{\partial^2P_0}{\partial\varphi^2}+\frac{3}{h_0}\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}\frac{\partial h_0}{\partial\varphi}\right]=$$

$$=\mu\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t}+\left(\omega_1+\omega_2\right)\frac{\partial h_0}{\partial\varphi}\right]. \quad (27)$$

Теория короткого подшипника и распределение давления в зазоре для короткого подшипника

Чтобы решить уравнение Рейнольдса для случая значительных центробежных сил (27), сначала рассмотрим случай короткого подшипника, то есть $h_0/R\ll1$, в предположении, что изменение давления по φ много меньше, чем по направлению z, то есть $\left|\frac{\partial P_0}{\partial\varphi}\right|\ll\left|\frac{\partial P_0}{\partial z}\right|$.

Вводя безразмерные переменные (масштабы) [1] вида

$$P_0^*=\frac{P_0}{6\mu\left(\frac{L}{h_{00}}\right)^2};\ \ z^*=z/L,$$

приведем уравнение (27) к следующему виду:

$$h_0\left(\frac{h_0}{h_{00}}\right)^2\frac{\partial^2P_0^*}{\partial z^{*2}}+h_0\left(\frac{h_0}{h_{00}}\right)^2\left(\frac{L}{R}\right)^2\left[\frac{\partial^2P_0^*}{\partial\varphi^2}+\ldots\right]=$$

$$=2\frac{\partial h_0}{\partial t}+(\omega_2+\omega_1)\frac{\partial h_0}{\partial\varphi}.$$

Отметим, что

$$\left(\frac{h_0}{h_{00}}\right)^2 \approx 1,$$

и для случая короткого подшипника

$$L/D << 1 \Rightarrow (L/D)^2 \to 0,$$

где $h_{00} = R - r_0$ — номинальный зазор; L, D — соответственно длина и диаметр подшипника.

Поэтому вторым слагаемым в уравнении (27) можно пренебречь (теория короткого подшипника). Тогда указанное уравнение принимает вид [2]:

$$\frac{h_0^3}{6}\frac{\partial^2 P_0}{\partial z^2} = \mu\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t} + (\omega_1 + \omega_2)\frac{\partial h_0}{\partial \varphi}\right]. \qquad (28)$$

Отметим, что глобальное давление смазки в зазоре дается формулой (10).

Две постоянных интегрирования в уравнении (28) могут быть определены с помощью граничного условия и условия симметрии [3]:

$$z = 0, r = R: \; p_0 = p_{in};$$

$$p_0(z) = p_0(-z), \; \forall z \in [0, L/2], \qquad (29)$$

где p_{in} — заданное давление на внутренней поверхности вращающегося цилиндра.

Интеграл в формуле (10) не зависит от z, поэтому функция P_0 должна обладать свойством симметрии. Решив уравнение Рейнольдса (28) с учетом указанного свойства, мы получим выражение

$$P_0(\varphi, z) =$$

$$= \frac{6\mu}{h_0^3}\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t} + (\omega_1 + \omega_2)\frac{\partial h_0}{\partial \varphi}\right]\left(\frac{1}{2}z^2 + C_0\right).$$

Применяя граничное условие (29), мы определим константу C_0 в этом уравнении и после подстановки P_0 в формулу (10) получим:

$$p_0(r, \varphi, z, t) = p_{in} - \rho\int_r^R \frac{v_0^2(\zeta)}{\zeta}d\zeta +$$

$$+ \frac{3\mu}{h_0^3}\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t} + (\omega_1 + \omega_2)\frac{\partial h_0}{\partial \varphi}\right]z^2, \qquad (30)$$

здесь $R - h_0 \le \zeta \le R$; p_0 — глобальное давление в зазоре, который ограничен следующим пространством:

$$R - h_0 \le r \le R; \quad 0 \le \varphi < 2\pi; \quad -L/2 \le z \le L/2.$$

Давление на концах подшипника, т. е. при $z = \pm L/2$, следует формуле

$$p_{00} = p_{in} - \rho\int_r^R \frac{v_0^2(r)}{r}dr + \frac{3\mu}{h_0^3}\times$$

$$\times\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t} + (\omega_1 + \omega_2)\frac{\partial h_0}{\partial \varphi}\right]\frac{L^2}{4}. \qquad (31)$$

С помощью формулы (30) и данного выражения (31) мы получаем окончательный результат для глобального давления в зазоре:

$$p_0(r, \varphi, z, t) =$$

$$= p_{00} + \frac{3\mu}{h_0^3}\left[2\frac{\partial h_0}{\partial t} + (\omega_1 + \omega_2)\frac{\partial h_0}{\partial \varphi}\right]\left(z^2 - \frac{L^2}{4}\right). \qquad (32)$$

Введем следующие кинематические переменные и обозначения (рис. 2): $e = e_b(t)$ — эксцентриситет центра плавающего ротора; $\gamma = \gamma_b(t)$ — угол, определяющий положение линии между центрами плавающего ротора и вращающегося цилиндра;

$$\theta = \theta(t, \varphi) = \varphi - \gamma_b(t).$$

Из тригонометрических соотношений в треугольнике OAB получается следующее выражение для ширины зазора через время t и угол φ:

$$h_0 = h_{00} - e\cos\theta \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow h_0 = h_{00} - e_b(t)\cos(\varphi - \gamma_b(t)). \qquad (33)$$

Подставив данное выражение для ширины зазора h_0 в формулы (31) и (32), получим распределение давления в зазоре для короткого подшипника:

$$p_{00}(r, \varphi, t) = p_{in} - \rho\int_r^R \frac{v_0^2(r)}{r}dr +$$

$$+ \frac{3\mu}{h_0^3}\left[(\omega_1 + \omega_2 - 2\dot{\gamma}_b)e_b\sin(\varphi - \gamma_b) - \right.$$

$$\left. - 2\dot{e}_b\cos(\varphi - \gamma_b)\right]\frac{L^2}{4}; \qquad (34)$$

$$p_0(r, \varphi, z, t) = p_{00} +$$

$$+ \frac{3\mu}{h_0^3}\left[(\omega_1 + \omega_2 - 2\dot{\gamma}_b)e_b\sin(\varphi - \gamma_b) - \right.$$

$$\left. - 2\dot{e}_b\cos(\varphi - \gamma_b)\right]\left(z^2 - \frac{L^2}{4}\right). \qquad (35)$$

Силы, действующие на ротор в подшипнике

Силы, действующие на ротор, можно определить с помощью интегрирования функции распределения давления. Согласно классической теории короткого подшипника давление исчезает на обоих концах подшипника, т. е. надо вычислить интеграл от разности давлений $\int(p_0 - p_{00})$ [3]. Интегрирование по z дает формулу для силы на единицу длины. Вводим обозначение $\theta = \theta(t,\varphi) = \varphi - \gamma_b(t)$; тогда получаем из формулы (35):

$$q_{0b} = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}(p_0 - p_{00})\,dz = \frac{\mu L^2(\omega_1+\omega_2)}{2{h_{00}}^2}\bar{q}_{0b}, \quad (36)$$

где

$$\bar{q}_{0b} = \frac{\left(\frac{2\dot{\gamma}_b}{\omega_1+\omega_2} - 1\right)\varepsilon_b \sin\theta + \frac{2\dot{\varepsilon}_b}{\omega_1+\omega_2}\cos\theta}{(1-\varepsilon_b\cos\theta)^3}$$

$$\left(\varepsilon_b = \frac{e_b}{h_{00}}\right). \quad (37)$$

Для того чтобы определить результирующую силу, действующую на внутреннюю поверхность фиксированного гнезда и на внешнюю поверхность вращающего плавающего цилиндра (кольца), для случая, показанного на рис.1, *б*, мы повторяем аналогичные вычисления для внешнего поля смазки.

Моменты, действующие на ротор в подшипнике

Моменты, действующие на ротор и на вращающийся цилиндр, можно определить с помощью интегрирования касательного напряжения $\tau_{r\varphi}$. В общем случае (см. рис.1,*б*), для того, чтобы найти момент, действующий на вращающийся плавающий цилиндр (кольцо), надо проинтегрировать $\tau_{r\varphi}$ по обеим сторонам кольца. Покажем, как вычисляется момент, действующий со стороны внутреннего поля смазки, на вращающийся цилиндр (кольцо) (момент, действующий на него с внешней стороны, вычисляется аналогично).

Из уравнения для тензора напряжений в цилиндрической системе координат получаем выражение для компоненты $\tau_{r\varphi}$:

$$\tau_{r\varphi} = \mu\left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial u}{\partial \varphi} - v\right)\right).$$

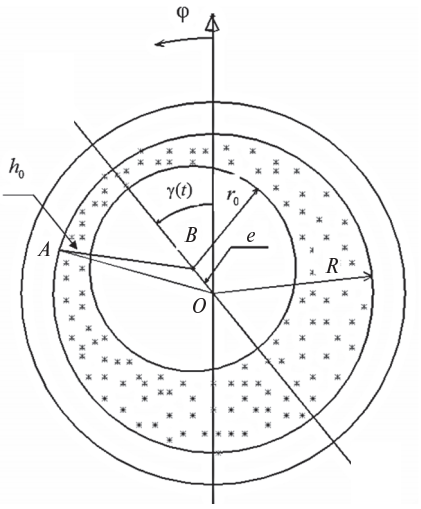


Рис. 2. Схема обозначений для упорного подшипника скольжения

Как и в начале работы, мы предположили, что радиальной компонентой скорости *u* можно пренебречь в сравнении с другими компонентами [3];

$$\tau_{r\varphi} = \mu\left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}\right). \quad (38)$$

Подставив выражение для компонента *v* из формул (12), (13) в формулу (38), получим два выражения для моментов.

1. Момент, действующий со стороны внутреннего поля смазки на вращающийся цилиндр,

$$M^b = R\int_0^{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2}\tau_{r\varphi}\Big|_{r=R}\,dz\,d\theta, \quad (39)$$

где

$$\tau_{r\varphi}\Big|_{r=R} = 2\bar{D}\left(1 - \frac{2\ln\left(\frac{R}{R-h_0}\right)}{\left(\frac{R}{R-h_0}\right)^2 - 1}\right) - \frac{2(\omega_1-\omega_2)}{\left(\frac{R}{R-h_0}\right)^2 - 1}. \quad (40)$$

2. Момент, действующий на ротор (вал)

$$M^j = \int_0^{2\pi}\left((R-h_0)\int_{-L/2}^{L/2}\tau_{r\varphi}\Big|_{r=R-h_0}\,dz\right)d\theta, \quad (41)$$

где

$$\tau_{r\varphi}\Big|_{r=R-h_0} =$$

$$= 2\overline{D}\left(1 - \frac{2\ln\left(\frac{R}{R-h_0}\right)}{1-\left(\frac{R-h_0}{R}\right)^2}\right) - \frac{2(\omega_1-\omega_2)}{1-\left(\frac{R-h_0}{R}\right)^2}; \quad (42)$$

величина $\overline{D}$, входящая в формулы (40) и (42), имеет вид

$$\overline{D} = \frac{1}{4}\frac{1}{\mu}z^2\frac{\partial}{\partial\theta}\left\{\frac{3\mu}{\left[h_{00}-e_b\cos\theta\right]^3}\times\right.$$

$$\left.\times\left[\left(\omega_1+\omega_2-2\dot{\gamma}_b\right)e_b\sin\theta - 2\dot{e}_b\cos\theta\right]\right\}. \quad (43)$$

Итак, в результате работы получены аналитические выражения, позволяющие вычислить все силы и моменты, действующие в упорных подшипниках скольжения. Это обеспечивает возможность записать уравнения движения ротора (вала) в зазоре:

$$F^j_{\xi_b} = m\ddot{x}; \quad F^j_{\eta_b} = m\ddot{y}; \quad M^j = I\ddot{\varphi},$$

где m, I — масса и момент инерции ротора (вала).

Дальнейший анализ сводится к решению уравнений движения ротора (вала) и плавающего вращающегося цилиндра (кольца) в общем случае для упорных подшипников скольжения и исследованию устойчивости движения ротора (вала) в зазоре.

Автор выражает искреннюю благодарность доктору физико-математических наук, профессору А.К. Беляеву за оказанную помощь при проведении работы и полезные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Лойцянский, Л.Г.** Механика жидкости и газа [Текст] / Л.Г. Лойцянский.— М.: Наука, 1987.— 840 с.

2. **Dubois, G.B.** Analytical derivation and experimental evaluation of short-bearing approximation for full journal bearing [Text] / G.B. Dubois, F.W. Ocvirk // Cornell Univ. Report.—1953.— No. 1157.— P. 119–127.

3. **Belyaev, A.K**. Forces and moments acting on the rapidly rotating floating bearing [Text] / A.K. Belyaev, Nguyen Van Thang // 36th International Summer School, Conference APM' 2008. Repino, Saint Petersburg, Russia.— P. 104–111.

4. **Hatakenaka, K**. A theoretical analysis of floating bush journal bearing with axial oil film ruptures being considered [Text] / K. Hatakenaka, M. Tanaka, K. Suzuki // Journal of tribology.— 2002.— Vol. 124.— No 3.— P. 494–505.

5. **Максимов, С.П.** Автоколебания роторов, вызванные масляным слоем подшипников скольжения [Текст] / С.П. Максимов // Труды ЦКТИ. Котлотурбостроение.— 1964.— № 44.— С. 87–96.

6. **Пешти, Ю.В.** Проектирование подшипников скольжения с газовой смазкой [Текст] / Ю.В. Пешти // Высшее техническое училище им. Н.Э. Баумана, МВТУ.— 1973.— 171 с.

УДК 539.3

В.М. Жгутов

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, АЛГОРИТМ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ УПРУГИХ РЕБРИСТЫХ ОБОЛОЧЕК ПРИ КОНЕЧНЫХ ПРОГИБАХ

Оболочки как элементы разного рода конструкций находят широкое применение в космической, ракетной и авиационной технике, машиностроении, судостроении, промышленном и гражданском строительстве благодаря практически неисчерпаемому разнообразию геометрических форм, высокой несущей способности при относительно низкой материалоемкости.

Для придания большей жесткости тонкостенная часть оболочки зачастую подкрепляет-

ся ребрами, что существенно повышает ее несущую способность при незначительном увеличении массы конструкции.

Указанные конструкции могут подвергаться как статическим, так и динамическим нагрузкам, допуская прогибы, соизмеримые с толщиной оболочки.

Расчеты на прочность, устойчивость и колебания таких конструкций играют важную роль при проектировании современных аппаратов, машин и сооружений. Тем не менее, поведение тонкостенных конструкций, содержащих ребра, при котором проявляются геометрическая нелинейность, дискретность расположения ребер, их сдвиговая и крутильная жесткости, а также поперечные сдвиги, исследовано недостаточно. Причины тому — сложность совместного учета упомянутых факторов и необходимость решения громоздких нелинейных краевых задач.

Очевидно, что всесторонний анализ прочности и устойчивости оболочечных конструкций возможен только с помощью их компьютерного моделирования с проведением множества вычислительных экспериментов, открывающего исследователю в этой области поистине «царский путь». Для объяснения последнего словосочетания сделаем короткий экскурс в древнюю историю.

«В науке нет царских путей!» — так ответил Евклид (живший в IV–III веках до н. э.) египетскому царю Птоломею I (царствовавшему с 306 по 283 г. до н. э) на его вопрос первому о том, нет ли более быстрого и удобного пути для изучения геометрии, чем изложенный в «Началах» Евклида.

В процессе деформирования оболочек (в зависимости от уровня и длительности внешних воздействий) могут проявиться различные свойства материалов конструкций: упругие, пластические, свойства ползучести и т. п. Проявление свойства пластичности или ползучести приводит к необратимым последствиям. Для того чтобы конструкция являлась заведомо прочной и устойчивой, необходимо не допустить проявления этих свойств. Для этого можно, варьируя жесткостью подкреплений и кривизной оболочки, подбирать рациональные параметры конструкции при заданном уровне нагрузки и ограничениях на ее напряженно-деформированное состояние (НДС).

В свете изложенного актуальными и важными представляются задачи разработки более совершенных моделей деформирования оболочек ступенчато-переменной толщины и методик рационального выбора параметров и материала оболочечных конструкций, а также исследования прочности, устойчивости и колебаний указанных оболочек при учете различных свойств материала.

В настоящей работе, методологически связанной с предыдущими публикациями автора [1, 2], представлены результаты математического и компьютерного моделирования оболочек при статических нагрузках и упругом (точнее линейно-упругом) поведении материала.

Большинство работ, посвященных исследованию устойчивости оболочек, выполнено в линейной постановке и без учета поперечных сдвигов (модель Кирхгофа — Лява). Ребра задавались по линиям — без учета влияния сдвиговой и крутильной жесткостей ребер на НДС всей конструкции. К числу таких работ можно отнести публикации В.А. Заруцкого, а также И.Я. Амиро, в частности [3].

Геометрически нелинейные решения приведены в работах С.А. Тимашева и В.И. Климанова [4], но авторы не учитывали поперечных сдвигов и задавали ребра по линиям. В экспериментах, проведенных С.А. Тимашевым, выявлено весьма существенное влияние сдвиговой и крутильной жесткостей ребер на НДС всей конструкции.

В работе [5] разработана геометрически нелинейная теория упругих оболочек (на основе модели Тимошенко — Рейсснера, предполагающей эффект поперечных сдвигов), при которой ребра задаются дискретно с учетом их ширины, сдвиговой и крутильной жесткостей. Численные результаты были приведены для задач динамики ребристых оболочек, но с использованием гипотезы Кирхгофа — Лява.

Постановка задачи

Рассматриваем оболочки общего вида с краем (пологие на прямоугольном плане и вращения, в частности цилиндрические, конические, сферические, торообразные, а также некоторые другие оболочки).

Срединную поверхность оболочки (точнее, ее обшивки) толщиной h принимаем за отсчетную поверхность $z = 0$. Оси x и y криволинейной ортогональной системы координат ($-a \le x \le a$ и $-b \le y \le b$) направляем по линиям кривизны отсчетной поверхности, а ось z – по внутренней нормали поверхности $z = 0$ так, чтобы система

координат x, y, z была правой (полагаем, что определенная таким образом сеть координатных линий на отсчетной поверхности не имеет особенностей).

С внутренней стороны оболочка подкреплена ребрами жесткости, расставленными вдоль координатных линий.

Ребра задаем дискретно с помощью функции $H = H(x, y)$, характеризующей распределение ребер по оболочке, их ширину и высоту [5–7]. Таким образом, толщина всей конструкции равна $h + H$ и $-h/2 \le z \le h/2 + H$.

Считаем, что оболочка находится под действием механической нагрузки при определенном закреплении ее края (контура).

Предполагая упругое поведение материала, будем совместно учитывать геометрическую нелинейность, дискретное расположение ребер, их ширину, сдвиговую и крутильную жесткости, поперечные сдвиги.

Математическая модель упругих ребристых оболочек при конечных прогибах

Геометрические соотношения в срединной поверхности $z = 0$ получаются с помощью операции ковариантного дифференцирования векторного поля перемещений и с учетом геометрической нелинейности имеют вид

$$\varepsilon_x = \frac{1}{A}\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{AB}\frac{\partial A}{\partial y}V - K_x W + \frac{1}{2}\theta_1^2;$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{B}\frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1}{AB}\frac{\partial B}{\partial x}U - K_y W + \frac{1}{2}\theta_2^2;$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{A}\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{B}\frac{\partial U}{\partial y} - \frac{1}{AB}\left(\frac{\partial A}{\partial y}U + \frac{\partial B}{\partial x}V\right) + \theta_1\theta_2,$$

где ε_x, ε_y и γ_{xy} – деформации удлинения вдоль осей x, y и сдвига в касательной плоскости (dx, dy); U, V и W – компоненты вектора перемещений точек вдоль осей x, y, и z соответственно; A, B — метрические коэффициенты Ламе, зависящие от вида оболочки (например, $A = B = 1$ для пологой оболочки и $A = \text{const}$, $B = B(x)$ в случае оболочки вращения); $K_x = 1/R_1$ и $K_y = 1/R_2$ — главные кривизны (R_1 и R_2 – главные радиусы кривизны) оболочки вдоль осей x и y соответственно; $\theta_1 = -\left(\frac{1}{A}\frac{\partial W}{\partial x} + K_x U\right)$; $\theta_2 = -\left(\frac{1}{B}\frac{\partial W}{\partial y} + K_y V\right)$.

Деформации поперечных сдвигов определяем по формулам [1, 2, 5–12]:

$$\gamma_{xz} = cf(z)(\psi_x - \theta_1);\ \gamma_{yz} = cf(z)(\psi_y - \theta_2),$$

где ψ_x, ψ_y — углы поворота отрезка нормали в плоскостях (dx, dz) и (dy, dz) соответственно; $f(z)$ – функция, характеризующая распределение напряжений τ_{xz} и τ_{yz} вдоль оси z; c – константа.

Деформации в слое $z \ne 0$ вычисляем по формулам [1, 2, 5 — 12]:

$$\varepsilon_x^z = \varepsilon_x + z\chi_1;\ \varepsilon_y^z = \varepsilon_y + z\chi_2;\ \gamma_{xy}^z = \gamma_{xy} + 2z\chi_{12},$$

где

$$\chi_1 = \frac{1}{A}\frac{\partial \psi_x}{\partial x} + \frac{1}{AB}\frac{\partial A}{\partial y}\psi_y;$$

$$\chi_2 = \frac{1}{B}\frac{\partial \psi_y}{\partial y} + \frac{1}{AB}\frac{\partial B}{\partial x}\psi_x;$$

$$2\chi_{12} = \frac{1}{A}\frac{\partial \psi_y}{\partial x} + \frac{1}{B}\frac{\partial \psi_x}{\partial y} - \frac{1}{AB}\left(\frac{\partial A}{\partial y}\psi_x + \frac{\partial B}{\partial x}\psi_y\right)$$

— суть функции изменения кривизны и кручения.

Физические соотношения для ортотропных материалов (таких, как железобетон при различной жесткости армирования во взаимно ортогональных направлениях x и y, некоторые полимеры, дерево и др.) могут быть представлены в виде [9, 10, 12, 13]:

$$\sigma_x = G_1(\varepsilon_x^z + \mu_2\varepsilon_y^z);\ \sigma_y = G_2(\varepsilon_y^z + \mu_1\varepsilon_x^z);$$

$$\tau_{xy} = G_{12}\gamma_{xy}^z; \qquad (1)$$

$$\tau_{xz} = G_{13}\gamma_{xz};\ \tau_{yz} = G_{23}\gamma_{yz}.$$

Здесь $G_1 = \frac{E_1}{1-\mu_1\mu_2}$, $G_2 = \frac{E_2}{1-\mu_1\mu_2}$; G_{12}, G_{13}, G_{23} – модули сдвига, где E_1, E_2 и μ_1, μ_2 – продольные модули Юнга и коэффициенты Пуассона.

Для изотропных материалов (железобетон при одинаковой жесткости армирования по направлениям x и y, многие полимеры, металлы и др.) физические соотношения являются частным случаем соотношений (1), в которых $E_1 = E_2 = E$ и $\mu_1 = \mu_2 = \mu$, следовательно, $G_1 = G_2 = E/(1-\mu^2)$, $G_{12} = G_{13} = G_{23} = G = E/2(1+\mu)$.

Функционал полной энергии деформации оболочки (в общем случае выполненной из ортотропного материала) запишем в виде [1,2,12]:

$$\Э = \frac{G_1}{2}\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\Big\{(h+\bar{F})\Big[\varepsilon_x^2 + (\mu_2+\bar{G}_2\mu_1)\varepsilon_x\varepsilon_y +$$

$$+\bar{G}_2\varepsilon_y^2 + \bar{G}_{12}\gamma_{xy}^2 + \bar{G}_{13}k\left(\psi_x-\theta_1\right)^2 + \bar{G}_{23}k\left(\psi_y-\theta_2\right)^2\Big] +$$

$$+\bar{S}\Big[2\varepsilon_x\chi_1 + (\mu_2+\bar{G}_2\mu_1)\varepsilon_x\chi_2 +$$

$$+(\mu_2+\bar{G}_2\mu_1)\varepsilon_y\chi_1 + 2\bar{G}_2\varepsilon_y\chi_2 + 2\bar{G}_{12}\gamma_{xy}2\chi_{12}\Big] +$$

$$+\left(\frac{h^3}{12}+\bar{J}\right)\Big[\chi_1^2 + (\mu_2+\bar{G}_2\mu_1)\chi_1\chi_2 + \bar{G}_2\chi_2^2 + \bar{G}_{12}2\chi_{12}2\chi_{12}\Big] -$$

$$-\frac{2}{G_1}\left(P_xU + P_yV + qW\right)\Big\}ABdxdy, \qquad (2)$$

где $\bar{F}, \bar{S}$ и $\bar{J}$ — жесткостные характеристики ребер (погонные площадь поперечного (продольного) сечения ребра, статический момент и момент инерции этого сечения); P_x, P_y и q — продольные и поперечная компоненты внешней механической нагрузки (в дальнейшем полагаем, что $P_x = P_y = 0$ и $q \neq 0$); $\bar{G}_2 = \frac{G_2}{G_1}$, $\bar{G}_{12} = \frac{G_{12}}{G_1}$, $\bar{G}_{13} = \frac{G_{13}}{G_1}$, $\bar{G}_{23} = \frac{G_{23}}{G_1}$.

В случае изотропного материала функционал полной энергии деформации оболочки окажется частным случаем функционала (2), в котором $E_1 = E_2 = E$ и $\mu_1 = \mu_2 = \mu$, а значит, $G_1 = G_2 = E/(1-\mu^2)$, , $G_{12} = G_{13} = G_{23} = G = E/2(1+\mu)$ и, кроме того, $\bar{G}_2 = 1$, $\bar{G}_{12} = \bar{G}_{13} = \bar{G}_{23} = \frac{1-\mu}{2}$.

Алгоритм исследования модели

Для отыскания минимума энергии (2) применяем метод Ритца при разложении искомых функций $U(x, y)$, $V(x, y)$, $W(x, y)$, $\psi_x(x, y)$, $\psi_y(x, y)$ в ряды [1,2, 8–11, 13 — 15]:

$$U = \sum_{I=1}^{N} U(I)X1(I)Y1(I); \quad V = \sum_{I=1}^{N} V(I)X2(I)Y2(I);$$

$$W = \sum_{I=1}^{N} U(I)X1(I)Y1(I);$$

$$\Psi_x = \sum_{I=1}^{N} PS(I)X4(I)Y4(I);$$

$$\Psi_y = \sum_{I=1}^{N} PN(I)X5(I)Y5(I),$$

где $U(I)$, $V(I)$, $W(I)$, $PS(I)$, $PN(I)$ — неизвестные параметры (подлежащие определению); $X1(I)Y1(I)$, …, $X5(I)Y5(I)$ — известные аппроксимирующие функции переменных x и y, удовлетворяющие заданным краевым условиям (зависящим от способа закрепления контура оболочки); N – число членов в рядах Ритца.

В результате получаем нелинейную (в геометрическом смысле) систему алгебраических уравнений, которую кратко можно записать в виде [1, 2, 8–11, 13 — 15]:

$$F_{\text{л}}(X) - fq = -F_{\text{н}}(X), \qquad (3)$$

где $X = \left[U(I),\ V(I),\ W(I), PS(I),\ PN(I)\right]^T$ – матрица неизвестных параметров; fq — нагрузочный член с коэффициентом f; $F_{\text{л}}(X)$, $F_{\text{н}}(X)$ — соответственно линейная и нелинейная (геометрически) части системы (3).

Для решения системы (3) применяем метод итераций [1, 2, 8–11, 13–15].

Последовательно увеличивая нагрузку q от 0 до некоторого критического значения $q_{\text{кр}}$ с малым шагом (например $\Delta q = 10^{-3}$ МПа), находим решения системы (3), отвечающие значениям нагрузки q_1, q_2, ..., q_k:

$$F_{\text{л}}(X_j) - fq = -F_{\text{н}}(X_{j-1}),$$

где X_0 – решение геометрически линейной задачи, отвечающее условию $F_{\text{н}}(X) = 0$.

При фиксированном значении нагрузки q можно определить значения функций перемещений $U(x, y)$, $V(x, y)$, $W(x, y)$ и углов поворота отрезка нормали $\psi_x(x, y)$, $\psi_y(x, y)$ в любой точке оболочки, а с их помощью — НДС оболочки в данной точке.

После этого строим кривую нагрузка q — прогиб W в какой-либо характерной точке оболочки (например в центре оболочки). Нагрузку q, соответствующую максимальному значению на кривой q — W (критерий Вольмира), либо нагрузку, отвечающую резкому возрастанию прогибов (более общий критерий), принимаем за критическое значение нагрузки $q_{\text{кр}}$.

При этом мы подразумеваем нахождение первого критического значения нагрузки (значения $q_{кр}$, отвечающего началу смены равновесных состояний, с увеличением которого происходит характерное «прощелкивание» или «выпучивание» оболочки).

Для ответа на вопрос о соответствии найденного значения $q_{кр}$ общей или местной потере устойчивости необходимы дополнительные исследования.

Указанным способом исследуем устойчивость оболочки в упругой постановке (при учете геометрической нелинейности).

С помощью вычислительных экспериментов были проанализированы различные варианты ребристых оболочек, выполненных из железобетона, металла и оргстекла.

Анализ устойчивости оболочек

Приведем некоторые численные результаты для железобетонных, металлических и полимерных пологих оболочек положительной гауссовой кривизны $K = K_x \cdot K_y$.

Для удобства представления и анализа результатов функционал (2) был записан в безразмерных параметрах, описанных в [1, 2, 8, 9, 11, 13, 14], в частности: безразмерных координатах $\xi = x/a$, $\eta = y/b$; безразмерных кривизнах $k_\xi = a^2 K_x / h$, $k_\eta = b^2 K_y / h$; безразмерных перемещениях $\bar{U} = aU/h^2$, $\bar{V} = bV/h^2$, $\bar{W} = W/h$ и углах $\bar{\psi}_x = a\psi_x / h$, $\bar{\psi}_y = b\psi_y / h$; безразмерной нагрузке $\bar{P} = a^4 q / Eh^4$.

Варианты и соответствующие параметры проанализированных пологих оболочек на прямоугольном плане представлены в табл. 1.

Для каждого варианта рассматривались как гладкие оболочки (не имеющие ребер), так и ребристые, подкрепленные регулярным набором из шести либо восемнадцати ребер. Считалось, что ребра расставлены вдоль координатных линий x и y соответственно по 3 ребра либо по 9 ребер в каждом из указанных направлений. Высота ребер принималась $3h$; их ширина полагалась равной $2h$; $3{,}3h$; $6{,}6h$ и $20h$ соответственно для вариантов оболочек I, II, III и IV.

Кроме того, в расчетах принимались следующие условия: поперечная нагрузка q равномерно распределена ($q = \text{const} > 0$); контур оболочки закреплен шарнирно-неподвижным способом; число членов разложений в рядах Ритца $N = 9$; коэффициент Пуассона $\mu = 0{,}200$ (для бетона), $\mu = 0{,}300$ (для металла) и $\mu = 0{,}354$ (для оргстекла).

В табл. 2 приведены для рассматриваемых вариантов гладких и ребристых оболочек расчетные значения безразмерных критических нагрузок $\bar{P}_{кр}$, найденные в предположении линейно-упругого поведения материала (с учетом геометрической нелинейности).

Как видно из результатов, приведенных в табл. 2, ребристые оболочки варианта I (наименее тонкие) устойчивости не теряют.

Результаты расчетов хорошо согласуются с данными натурных экспериментов В.И. Климанова и С.А. Тимашева для серии ребристых оболочек, выполненных из оргстекла и по своим параметрам весьма близких к анализируемым нами оболочкам варианта IV с восемнадцатью ребрами [4, 15].

Отдельная серия расчетов гладких и ребристых оболочек базового варианта III, отличающихся по кривизне, показала, что с уменьшением средней кривизны оболочек $K_{ср} = (K_x + K_y)/2$ (соответственно, безразмерной средней кривизны $\bar{K}_{ср} = (k_\xi + k_\eta)/2$) критические нагрузки $\bar{P}_{кр}$ уменьшаются (при $h = \text{const}$).

Таблица 1

Параметры проанализированных оболочек

Вариант оболочки	Параметры оболочки			Возможные реальные размеры, м		
	$a = b$	$R_1 = R_2$	$k_\xi = k_\eta$	$a = b$	$R_1 = R_2$	h
I	$60h$	$225h$	16	18	67,5	0,3
II	$100h$	$251h$	40	18	45,3	0,18
III	$200h$	$503h$	79,5	18	45,3	0,09
IV	$600h$	$1510h$	238	18	45,3	0,03

Таблица 2

Расчетные значения безразмерной критической нагрузки $\bar{P}_{кр}$ для упругих гладких и ребристых оболочек, выполненных из железобетона, металла и оргстекла

Вариант оболочки	Материал оболочки	Значение безразмерной критической нагрузки $\bar{P}_{кр}$ при числе ребер		
		0	6 (3 + 3)	18(9 + 9)
I	Железобетон	171	–	–
	Металл	190	–	–
	Оргстекло	202	–	–
II	Железобетон	990	2260	3480
	Металл	1140	2800	3610
	Оргстекло	1200	29600	3710
III	Железобетон	5050	13260	18900
	Металл	5390	13770	20220
	Оргстекло	5610	14900	20900
IV	Железобетон	66990	134700	211400
	Металл	71300	141480	212420
	Оргстекло	74000	144800	212800

Дополнительные варианты оболочек базового варианта III представлены в табл. 3, воспроизведенной из прежней работы автора [1].

В табл. 4 приведены расчетные значения $\bar{P}_{кр}$ критических нагрузок для гладких оболочек дополнительных вариантов, выполненных из железобетона, металла и оргстекла. В скобках приведены процентные изменения (снижения) значений критических нагрузок вследствие уменьшения средней кривизны (для каждого дополнительного варианта оболочки в сравнении с базовым вариантом).

Видно, что с уменьшением средней кривизны значения соответствующих критических нагрузок также снижаются. В процентном отношении указанное снижение происходит примерно одинаково для оболочек одного и того же варианта, выполненных из разных материалов. Следует отметить, однако, что чуть большие снижения наблюдаются для оболочек из менее сжимаемого материала (оргстекла с величиной $\mu = 0{,}354$ по сравнению с металлом, где $\mu = 0{,}300$, и металла по сравнению с железобетоном, имеющим $\mu = 0{,}200$ в нашем случае).

Расчеты показали также, что вблизи критических нагрузок напряжения в материале оболочки достигают достаточно высокого уровня. Поэтому при исследовании устойчивости оболочек необходим контроль их прочности на основании того или иного критерия (исходя из принятого коэффициента запаса прочности k) [9–11, 14, 16].

Оказалось, что в случае оболочек положительной или нулевой гауссовой кривизны вбли-

Таблица 3

Параметры дополнительно проанализированных оболочек базового варианта III

Вариант оболочки	Параметры оболочки			Возможные реальные размеры, м		
	$a = b$	$R_1 = R_2$	$k_\xi = k_\eta$	$a = b$	$R_1 = R_2$	h
III (базовый)	$200h$	$503h$	79,5	18	5,3	0,09
III–А	$200h$	$600\,h$	66,7	18	54,0	0,09
III–Б	$200h$	$700h$	57,1	18	63,0	0,09
III–В	$200h$	$800h$	50	18	72,0	0,09

Таблица 4

Расчетные значения безразмерных критических нагрузок $\overline{P}_{кр}$ для гладких оболочек базового и дополнительных вариантов, выполненных из оргстекла, металла и железобетона

Вариант гладкой оболочки	$\overline{P}_{кр}$		
	Оргстекло ($\mu = 0{,}354$)	Металл ($\mu = 0{,}300$)	Железобетон ($\mu = 0{,}200$)
III (базовый)	5610	5390	5050
III-А	3590 (–36,0%)	3470 (–35,6%)	3270 (–35,2%)
III-Б	2380 (–57,6%)	2330 (–56,8%)	2240 (–55,6%)
III-В	1680 (–70,1%)	1660 (–69,2%)	1620 (–67,9%)

зи критических нагрузок для большинства из рассмотренных материалов происходит нарушение прочности оболочек (при значении коэффициента запаса $k = 2$) до потери их устойчивости. При увеличении толщины оболочек или числа ребер (при неизменных их жесткостных характеристиках) критические нагрузки возрастают. При этом характер распределения прогибов и напряжений по полю оболочки становится равномернее. С увеличением средней кривизны оболочки (при постоянных толщине оболочки, числе и жесткостных характеристиках ребер) критические нагрузки также увеличиваются.

При отрицательной гауссовой кривизне оболочки устойчивости не теряют.

При этом с уменьшением кривизны оболочки значения поперечных перемещений (прогибов) и максимальных напряжений (при одних и тех же значениях предварительных нагрузок) также уменьшаются.

Высокие уровни напряжений, возникающих в материалах оболочек вблизи критических нагрузок, могут повлечь за собой пластические деформации (особенно в металлических и железобетонных оболочках), что приведет, вообще говоря, к значительному снижению их несущей способности.

При длительных нагрузках в материалах оболочек (таких как железобетон, оргстекло и др.) возможно развитие процесса ползучести (в металлах ползучесть наблюдается только при высоких температурах). Проявление ползучести материала оболочек также приводит к опасному снижению их несущей способности.

Вот почему при проектировании оболочечных конструкций необходимо проводить расчеты на прочность и устойчивость не только в упругой постановке, но и с учетом нелинейно-упругих и пластических деформаций, а также деформаций ползучести.

Полученные в результате вычислительного эксперимента данные позволяют посредством рационального выбора материала, толщины и кривизны оболочек при той или иной жесткости их подкреплений проектировать заведомо прочные и устойчиво работающие оболочечные конструкции, исключающие в заданных условиях эксплуатации появление пластических деформаций и деформаций ползучести в их материалах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Жгутов, В.М.** Математическая модель, алгоритм исследования и анализ устойчивости нелинейно-упругих ребристых оболочек при больших перемещениях [Текст] / В.М. Жгутов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 4. — С. 24–30.

2. **Жгутов, В.М.** Математические модели, алгоритм исследования и анализ устойчивости ребристых оболочек с учетом ползучести материала при конечных прогибах [Текст] / В.М. Жгутов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2010. — № 2. — С. 53–59.

3. **Амиро, И.Я.** Методы расчета оболочек [Текст]. В 2-х т. Т. 2: Теория ребристых оболочек/ И.Я Амиро, В.А. Заруцкий. — Киев: Наук. думка, 1980. — 368 с.

4. **Климанов, В.И.** Нелинейные задачи подкрепленных оболочек [Текст] / В.И. Климанов, С.А. Тимашев.– Свердловск: УНЦ АН СССР, 1985. — 291 с.

5. **Жгутов, В.М.** Нелинейные свободные колебания пологих оболочек ступенчато-переменной толщины [Текст]: дисс. ... канд. техн. наук: 05.23.17: защищена 29.04.04: утв. 09.07.04 / Жгутов Владимир Михайлович. — СПб, 2004. — 177 с. — Библиогр.: С. 125 — 145.

6**.** Нелинейные математические модели деформирования оболочек переменной толщины и алгоритмы их исследования [Текст]: учеб. пос. / В.В. Карпов, О.В. Игнатьев, А.Ю. Сальников. — М.: АСВ; СПб: СПбГАСУ, 2002.– 420 с.

7. **Жгутов, В.М.** Метод конструктивной анизотропии для ортотропных и изотропных ребристых оболочек [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. — 2009.– № 8.– С. 40–46.

8. **Жгутов, В.М.** Прочность и устойчивость ребристых пологих оболочек с учетом геометрической и физической нелинейности [Текст] / В.М. Жгутов, Д.Е. Мухин, А.Н. Панин // Сейсмостойкое строительство. Безопасность сооружений. — 2008. — № 2. — С. 41–44.

9. **Жгутов, В.М.** Исследование прочности и устойчивости ребристых оболочек с помощью вычислительного эксперимента [Текст] / В.М. Жгутов // Проблемы прочности материалов и сооружений на транспорте: Сб. докл. VII Междунар. конф. по проблемам прочности материалов и сооружений на транспорте 23–24 апреля 2008 года. — СПб.: Петербургский государственный университет путей сообщения, 2008. —С. 110–131.

10. **Жгутов, В.М.** Математическая модель и алгоритм исследования прочности и устойчивости ребристых оболочек с учетом различных свойств материала [Текст] / В.М. Жгутов // «Инженерные системы — 2008»: Всеросс. научн.-практ. конф. Москва, 7–11 апреля 2008 года, РУДН. — М.: Изд-во РУДН, 2008. — С. 341–346.

11. **Жгутов, В.М.** Компьютерное моделирование прочности и устойчивости упругих ребристых оболочек [Текст] / В.М. Жгутов // «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решения»: Междунар. конф. (RELMAS'2008). С.-Петербург, 17–20 июля 2008 года, СПбГПУ. — СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. —С. 122–128.

12. **Жгутов, В.М.** Прочность и устойчивость упругих ортотропных и изотропных ребристых оболочек. I [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. — 2009.– № 7.– С. 55–64.

13. **Жгутов, В.М.** Математические модели и алгоритмы исследования устойчивости пологих ребристых оболочек при учете различных свойств материала [Текст] / В.М. Жгутов // Изв. Орловского государственного технического университета. Сер. «Строительство, транспорт». — 2007.— № 4.– С. 20–23.

14. **Жгутов, В.М.** Прочность и устойчивость упругих ортотропных и изотропных ребристых оболочек. II [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. — 2009.– № 8.– С. 31–39.

15. **Жгутов, В.М.** Прочность и устойчивость упругих ортотропных и изотропных ребристых оболочек. III [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал.— 2010.– № 6.– С. 23–37.

16. **Жгутов, В.М.** Исследование прочности и устойчивости упругих, нелинейно-упругих и вязкоупругих ребристых оболочек с помощью вычислительного эксперимента [Текст] / В.М. Жгутов // Тр. Междунар. научн.-практ. конф. «Инженерные системы– 2010». Москва, 6–9 апреля 2010 г. — М.: РУДН, 2010. —С. 362–366.

Ф.П. Кесаманлы

АНДРЕЙ ДМИТРИЕВИЧ САХАРОВ

(к 90-летию со дня рождения)

Завидую Андрею Сахарову. Мой мозг устроен так,
что может работать как хорошо отлаженная,
быстродействующая электронно-вычислительная машина.
Но эта машина работает только по заранее составленной программе.
Мозг же Андрея Дмитриевича сам задает себе программу.

Я.Б. Зельдович [2, с.135]

Долгие раздумья над тем, как начать настоящий историко-биографический очерк, привели автора к мысли, что сделать это лучше всего словами академика А.В. Гапонова-Грехова (р. 1926), сказанными им об Андрее Дмитриевиче через месяц с небольшим после его смерти на открытии первых Сахаровских чтений в Горьком (ныне Нижний Новгород): «Все люди — я говорю, конечно, о людях сильных, талантливых — обычно целиком проявляются либо в творчестве (искусстве, науке), либо в практической работе (технике, строительстве, хозяйственной деятельности), либо в организационной и общественной жизни, политике. Может быть, это не вполне удачные определения, может точнее и правильнее сказать короче, что все люди либо творцы, либо строители, либо борцы. И практически никогда эти разные по своей сути качества не совмещаются в одном человеке: одни делают революции, другие строят, а третьи творят, сидя, как иногда говорят, “в башне из слоновой кости”. Мало кому — даже из самых великих — удавалось добиться равных или даже сопоставимых успехов хотя бы в двух из этих трех видов человеческой активности, самореализации этих разных типов интеллектуально-психического генотипа человека, потому что они фактически противоречат друг другу.

Абсолютная исключительность Андрея Дмитриевича Сахарова — в его равновеликости во всех трех ипостасях: и как ученого, и как инженера, и как общественного деятеля. И невозможно сказать, в чем он более велик и в каком качестве он глубже вошел в историю человечества» [3, с. 35].

А.Д. Сахаров родился 21 мая 1921 года в Москве в интеллигентной и дружной русской семье (его младший брат Георгий (Юрий) родился в 1925 году). Род Сахаровых известен с конца XVIII века. В нем было несколько поколений священников [10, с. 638–661]. Прапрапрадед Андрея Дмитриевича, Иосиф Васильевич, не имевший фамилии, был священником села Ивановское Ардатовского уезда Нижегородской губернии. Его единственный сын, Иоанн Иосифович (1789–1867), родившийся в этом селе, получил фамилию Сахаров при поступлении в Нижегородскую духовную семинарию. В 1829 году отец Иоанн был возведен в сан протоиерея, с 1845 по 1864 год был благочинным церквей Арзамаса. Он имел много наград, в том числе орден Святой Анны 2-й степени.

Прадед А.Д. Сахарова, Николай Иванович (1837–1916), окончил духовную семинарию в 1856 году и в том же году женился на Александре Алексеевне (1839–1916), внучке протоиерея

Н.А. Терновского (1782–1856), священника церкви в селе Выездном около Арзамаса, который трагически погиб — утонул в реке, когда шел к умирающему для свершения требы. Николай Иванович (отец Николай) занял его место, а в 1900 году был избран благочинным нижегородских верхнепосадских церквей. Он был удостоен звания Почетного гражданина, прожил 79 лет, из них 50 лет был священником. Имел десять детей; все дети получили образование: ни один из сыновей не стал сельским батюшкой, ни одна из дочерей не сделалась сельской попадьей [3, с. 252].

Дед Андрея Дмитриевича, Иван Николаевич (1860–1918), ушел из духовного сословия. В 1879 году окончил Нижегородскую гимназию, а в 1884 году — юридический факультет Московского университета, причем первым по списку, в звании кандидата права. С 1885 года служил у известного адвоката и общественного деятеля Н.Ф. Плевако (1842–1908/9). Впоследствии Иван Николаевич стал процветающим адвокатом, занимался общественной деятельностью.

Отец Андрея Дмитриевича, Дмитрий Иванович Сахаров (1889–1961), был известным педагогом, воспитавшим не одно поколение учителей физики, которые с благодарностью вспоминают его [3, с. 262–266]. Он в 1907 году окончил гимназию с серебряной медалью и, кроме того, с золотой медалью Гнесинское училище по классу фортепиано (фамилию Сахаров до сих пор можно видеть на мемориальной доске в училище в числе лучших выпускников-медалистов), затем поступил в Московский университет и в 1912 году окончил физико-математический факультет. После окончания университета он несколько лет работал в различных средних учебных заведениях. Впоследствии стал преподавать в вузах: в Педагогическом институте им. В.И. Ленина, а после — в Областном педагогическом им. Н.К. Крупской. Был доцентом, кандидатом педагогических наук.

Дмитрий Иванович не только преподавал, но и писал научно-популярные книги и учебники. У него был необычайно ясный и краткий, спрессованный стиль, очень точный и легко понимаемый язык. Его первая книга «Борьба за свет», напечатанная в 1925 году в Москве в акционерном издательстве «Радуга» очень большим по тем временам 25-тысячным тиражом, была быстро распродана и стала библиографической редкостью. В этой работе было дано популярное изложение физики и истории разработки осветительных приборов от древности до наших дней. За ней пошли другие книги: «Рабочая книга по физике», части I и II, в соавторстве с С.Г. Егоровым (1926); «Физические основы устройства трамвая», М.–Л. (1927); «Электрическая лампочка и физические опыты с нею», М.–Л. (1930). Однако главными трудами Дмитрия Ивановича были «Сборник задач по физике», последнее, 12-е издание которого вышло в 1973 году, и учебник «Физика для техникумов», написанный в соавторстве с М.И. Блудовым. Первое его издание увидело свет в 1960, 3-е, переработанное — в 1965, 5-е, последнее — в 1969 году. Последние издания задачника выходили под редакцией Андрея Дмитриевича. Он вместе с М.И. Блудовым принимал участие и в переработке учебника.

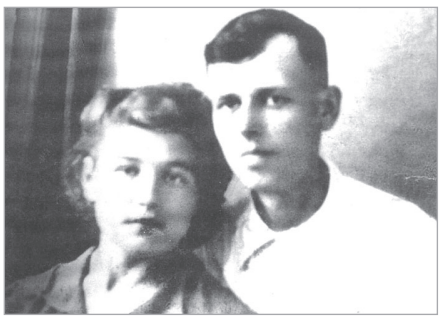
Мать Андрея Дмитриевича, Екатерина Алексеевна Сахарова, урожденная Софиано (1893–1963), была греческого происхождения, родилась и выросла в семье профессионального военного, получила образование в Дворянском институте в Москве. Это было привилегированное, но по тому времени не очень современное и практическое учебное заведение, дававшее скорее воспитание, чем образование или тем более специальность. Окончив институт, она несколько лет преподавала гимнастику в различных учебных заведениях. В одном из этих учебных заведений в 1915–1918 годах физику преподавал Дмитрий Иванович. Там они познакомились и в 1918 году поженились. Венчались они в храме Большого Вознесения, т. е. в той же церкви, что и Пушкин с Натальей Николаевной [10, с. 756–757]. Екатерина Алексеевна была верующей. После замужества она не работала.

Семья Андрея Дмитриевича с 1922 года жила в большой московской коммунальной квартире дома № 3 по Гранатному переулку и занимала две комнаты. В этой же квартире в комнатах отдельно жили также бабушка (мать отца) и семьи братьев отца, Ивана и Николая. Кроме Сахаровых в квартире вполне мирно жили еще две семьи.

Первые книжки маленькому Андрею читала бабушка, но очень скоро, в 4 года, он научился читать сам по вывескам, названиям пароходов; потом мама помогала ему в этом совершенствоваться. С осени 1927 до весны 1928 года с ним занималась учительница (чтением, чистописанием, арифметикой). По желанию родителей первые пять лет Андрей учился не в школе, а дома.

Андрей Сахаров
с младшим братом Георгием (Юрой).
1930 год

Весной 1934 года он сдал экзамен за 6-й класс и был зачислен в 7-й. В школе увлекался физикой, математикой и биологией. Проводил дома опыты, читал научно-популярные, научно-развлекательные книги: «Занимательная физика», «Занимательная геометрия», «Занимательная алгебра» Я.И. Перельмана; «Охотники за микробами» Поля де Крюи, «Занимательная биология» Цингера и другие. В 9–10 классах изучал и вполне научные книги. В 1938 году окончил школу с отличием и поступил без экзаменов на физический факультет Московского государственного университета. Осенью 1941 года Андрей Дмитриевич вместе с университетом был эвакуирован в Ашхабад, где в 1942 году и окончил его с отличием по специальности «Оборонное металловедение», после чего был направлен по распределению на военный завод. От предложения профессора А.А. Власова использовать свое право и поступить в аспирантуру отказался и поехал по распределению. В 1942–1945 годах работал в Ульяновске на Патронном заводе. Здесь он много занимался изобретательской работой и в результате стал автором нескольких изобретений в области методов контроля продукции. На заводе Андрей Дмитриевич 10 ноября 1942 года познакомился с Клавдией Алексеевной Вихиревой (1919–1969), которая 10 июля 1943 года стала его женой. У них родилось трое детей — Таня (7 февраля 1945 года), Люба (29 июля 1949 года) и Дмитрий (14 августа 1957 года). В эти военные годы Андрей Дмитриевич параллельно с работой на заводе изучал теоретическую физику и решал отдельные научные физические задачи. В 1944 году две из решенных задач он послал известному физику Игорю Евгеньевичу Тамму (1895–1971) — руководителю Отдела теоретической физики Физического института им. П.Н. Лебедева АН СССР (ФИАН). В конце декабря 1944 года Андрею Дмитриевичу пришел вызов в Москву в ФИАН для сдачи экзаменов в аспирантуру. Вызов пришел после того, как Дмитрий Иванович обратился с соответствующей просьбой к Игорю Евгеньевичу, с которым был знаком еще с 30-х годов.



Андрей Дмитриевич
с женой Клавдией Алексеевной.
1943 год

В середине января 1945 года Андрей Дмитриевич уволился с завода и поехал в Москву. В 1945–1947 годах он был аспирантом И.Е. Тамма. В период прохождения аспирантуры Андрей Дмитриевич помимо науки занимался преподавательской деятельностью: три семестра читал лекции в Московском энергетическом институте, затем еще полгода вел занятия в вечерней школе рабочей молодежи при Курчатовском институте.

Защита кандидатской диссертации А.Д. Сахарова на тему «Теория ядерных переходов типа $O \rightarrow O$» состоялась 3 ноября 1947 года на заседании Ученого совета ФИАНа под председательством академика С.И. Вавилова (1891–1951). Оппонентами были А.Б. Мигдал (1911–1991) и И.Я. Померанчук (1913–1966), оба — будущие академики. Текст диссертации и стенограмма заседания Ученого совета приведены в сборнике [1].

В сороковые годы прошлого столетия у нас в стране под руководством И.В. Курчатова (1903–1960) и Ю.Б. Харитона (1904–1996) велась интенсивная работа над созданием атомной бомбы. Параллельно с этим проводились поисковые исследования по разработке водородной

бомбы. Инициатива создания водородной бомбы в США принадлежит Эдварду Теллеру (1908–2003) и относится к 1942 году. В СССР этот вопрос был поставлен в 1946 году в специальном докладе И.И. Гуревича, Я.Б. Зельдовича, И.Я. Померанчука и Ю.Б. Харитона. Вскоре в Институте химической физики АН СССР небольшой группой сотрудников (А.С. Компанеец, С.П. Дьяков) под руководством Я.Б. Зельдовича были начаты исследования этой проблемы.

В 1946 году к атомной проблеме И.В. Курчатов привлек И.Е. Тамма, а в 1948 году для расширения исследований по водородной бомбе в ФИАНе была создана специальная группа под его руководством. В эту группу входили С.З. Беленький, В.Л. Гинзбург, А.Д. Сахаров и Ю.А. Романов. Группа Тамма должна была проанализировать отчеты группы Я.Б. Зельдовича по водородной бомбе и по мере возможности уточнить, исправить и дополнить их, а также дать независимое заключение по всему проекту в целом. По истечении двух месяцев со дня начала знакомства с отчетами А.Д. Сахаров сделал крутой поворот в работе. Он предложил альтернативный вариант термоядерного заряда, совершенно отличный от рассматриваемого группой Зельдовича по происходящим при взрыве физическим процессам и даже по основному источнику энерговыделения. Свой вариант Сахаров, не раскрывая замысла из-за секретности содержания, назвал *первой идеей*. Вскоре вариант Сахарова дополнил Гинзбург, выдвинув *вторую идею*. В 1990 году первая и вторая идеи были рассекречены в статьях В.И. Ритуса [7, с. 10–19] и Ю.А. Романова [7, с. 20–24]. Приведем здесь содержание этих двух идей в изложении Романова.

«В качестве горючего для термоядерного устройства группой Зельдовича рассматривался до этого жидкий дейтерий (возможно, в смеси с тритием). Сахаров предложил свой вариант: гетерогенную конструкцию из чередующихся слоев легкого вещества (дейтерий, тритий и их химические соединения) и тяжелого (^{238}U), названную им «слойкой».

В чем же преимущества такого «слоеного пирога»? Во-первых, он дает возможность реализовать принцип «деление — синтез — деление», необходимый для повышения энергии взрыва. Нейтроны от дейтерий-тритиевой реакции с энергией выше порога деления ^{238}U делят его, в результате чего выделяется дополнительная энергия. Но, что более важно, благодаря низкой теплопроводности урана сильно уменьшается теплоотток из вещества бомбы и, наконец, находясь в непосредственном соседстве с ураном, легкое вещество при нагреве до температур в десятки миллионов градусов оказывается сжатым в несколько раз. Это явление в кругах разработчиков ядерного оружия получило название «сахаризация». Физическая причина сахаризации предельно проста: при сверхвысоких температурах, когда вещество практически полностью ионизовано, выравниванию давлений в тяжелом и легком веществах отвечает одинаковая плотность электронов в них. А это означает, что легкое вещество должно находиться в сильно сжатом состоянии, что, собственно, и нужно для увеличения скорости реакции синтеза. Если же в «слойку» включить еще и литий, то под действием нейтронов он будет превращаться в тритий, очень эффективно (как уже говорилось) участвующий в термоядерной реакции.

Идея применения в «слойке» изотопа лития принадлежит В.Л. Гинзбургу. Дейтерид лития LiD ласково именовался им «лидочкой», хотя в отчетах, которые, как правило, писались от руки, вещества обозначались их условными наименованиями. И.В. Курчатов правильно оценил большие перспективы применения лития, оперативно организовав его производство. В результате Советский Союз первым применил его в испытаниях водородного оружия» [7, с. 21].

29 августа 1949 года была успешно испытана изготовленная в нашей стране атомная бомба. После этого работы по «слойке» стали более приоритетными, и конструкция водородной бомбы начала приобретать реалистический облик. Это потребовало постоянного присутствия А.Д. Сахарова на «объекте» — во Всесоюзном научно-исследовательском институте экспериментальной физики (ВНИИЭФ), где с 1946 года были сосредоточены основные исследования по созданию ядерного оружия. Общее руководство проблемой там осуществлялось И.В. Курчатовым, а научным руководителем работ и главным конструктором был Ю.Б. Харитон.

17 марта 1950 года Андрей Дмитриевич и Ю.А. Романов на транспортном самолете ЛИ-2 отбыли во ВНИИЭФ на постоянную работу. Через месяц к ним присоединился и И.Е. Тамм.

Понадобилось еще три с половиной года интенсивного и целенаправленного труда много-

А.Д. Сахаров с И.В. Курчатовым.
Сентябрь 1958 года

численных коллективов ученых, инженеров и рабочих, чтобы разработать, изготовить и подготовить к испытанию вариант водородной бомбы, в конструкции которой были реализованы основополагающие идеи Сахарова. Поэтому его по праву называют «отцом водородной бомбы». Водородная бомба была успешно испытана 12 августа 1953 года.

После испытания водородной бомбы, во время которого И.Е. Тамм был заместителем И.В. Курчатова по испытаниям на полигоне, он просил Курчатова отпустить его в Москву, так как считал, что сделал все, что мог полезного для создания оружия, и хотел вновь вернуться к физике атомного ядра и электродинамике. Его просьба была удовлетворена. Вместо И.Е. Тамма руководителем группы стал А.Д. Сахаров.

После семилетнего перерыва на октябрь 1953 года были назначены выборы в Академию наук СССР. Еще весной Сахаров по указанию Курчатова подал документы (в качестве кандидата) на выборы членов-корреспондентов (обычный порядок — сначала ученые выбираются в члены-корреспонденты, а потом часть из них становится академиками), но осенью после испытаний Игорь Васильевич переиграл свой план, и Андрей Дмитриевич баллотировался сразу в академики. Выбираемые в Академию должны иметь ученую степень доктора наук. Летом на заседании Ученого совета «объекта» А.Д. Сахарову на основе представленного им автореферата была присуждена ученая степень доктора наук [9, с. 249].

Академические выборы проходят в два этапа: сначала на отделениях выбирают многократным тайным голосованием столько кандидатов в академики и члены-корреспонденты, сколько данному отделению выделено вакансий. Затем общее собрание выбирает из этих кандидатов большинством не менее 2/3 голосов от списочного состава за вычетом тех, кто по болезни или из-за заграничной командировки не может принимать участия в выборах. В подавляющем большинстве случаев общее собрание автоматически выбирает всех кандидатов, которых выдвигают отделения — число голосов «против» обычно бывает минимальным. В основном это те же академики, которые голосовали против данной кандидатуры на своем отделении, члены же других отделений традиционно доверяют результатам выборов первого этапа [9, с. 326].

Представляющий А.Д. Сахарова на собрании отделения академик И.В. Курчатов сообщил: «Этот человек сделал для обороны нашей Родины больше, чем мы все присутствующие здесь». При голосовании на отделении Андрей Дмитриевич получил требуемое число голосов с первого раза. На общем собрании 23 октября 1953 года 32-летний Андрей Дмитриевич был избран действительным членом Академии наук СССР. Таким образом он стал самым молодым ученым, когда-либо избиравшимся академиком АН СССР [2, с. 135]. Одновременно с ним академиками были избраны А.П. Александров, Л.А. Арцимович, Н.Н. Боголюбов, И.К. Кикоин, И.Е. Тамм, Ю.Б. Харитон и другие ученые.

В конце 1953 года указом Президиума Верховного Совета СССР И.Е. Тамму и А.Д. Сахарову были присвоены звания Героев Социалистического Труда, а постановлением Совета Министров СССР каждому из них была присуждена Сталинская премия в размере 500 тысяч рублей. Эта сумма значительно превышала размер открытых Сталинских премий. Тогда же было принято решение о строительстве им отдельных дач в подмосковном поселке Жуковка.

После бурных приветствий, банкетов, приемов по поводу защиты докторской диссертации, удачного испытания, избрания академиком, присвоения звания Героя Социалистического труда и присуждения Сталинской премии в конце второй половины 1953 года Андрей Дмитрие-

вич снова углубился в работу по термоядерному оружию.

Ранней весной 1954 года в обсуждениях с Я.Б. Зельдовичем родилась «*третья идея*» — система сжатия излучением, значительно усиливающая энергетический эффект термоядерного оружия. И подготовка к испытанию «настоящей», т. е. сбрасываемой с самолета водородной бомбы пошла быстрее. Все технические и технологические задачи удалось решить за полтора года после рождения основополагающих идей, высказанных Зельдовичем и Сахаровым. И в этом заслуга не только лидеров исследований, но и сильного, подготовленного опытом предыдущих работ коллектива молодых, очень энергичных ученых и инженеров.

22 ноября 1955 года успешным испытанием водородной бомбы, сброшенной с самолета, был завершен этап разработки основ термоядерного оружия.

Вечером после удачного испытания военный руководитель испытаний М.И. Неделин[1] пригласил к себе в коттедж на банкет узкий круг руководителей, участвующих в испытаниях.

«В одной из небольших комнат домика Неделина был накрыт парадный стол. <...> Наконец, все уселись. Коньяк разлит по бокалам. <...> Неделин кивнул в мою сторону, приглашая произнести первый тост. Я взял бокал, встал и сказал примерно следующее:

— Я предлагаю выпить за то, чтобы наши изделия взрывались так же успешно, как сегодня, над полигонами и никогда — над городами.

За столом наступило молчание, как будто я произнес нечто неприличное. Все замерли. Неделин усмехнулся и, тоже поднявшись с бокалом в руке, сказал:

– Разрешите рассказать одну притчу. Старик перед иконой с лампадкой, в одной рубахе, молится: «Направь и укрепи, направь и укрепи». А старуха лежит на печке и подает оттуда голос: «Ты, старый, молись только об укреплении, направить я и сама сумею!» Давайте выпьем за укрепление.

Я весь сжался, как мне кажется — побледнел (обычно я краснею). Несколько секунд все в комнате молчали, затем заговорили неестественно громко. Я же молча выпил свой коньяк и до конца вечера не открыл рта. Прошло много лет, а до сих пор у меня ощущение, как от удара хлыстом. Это не было чувство обиды или оскорбления. Меня вообще нелегко обидеть, шуткой — тем более. Но маршальская притча не была шуткой. Неделин счел необходимым дать отпор моему неприемлемому пацифистскому уклону, поставить на место меня и всех других, кому может прийти в голову нечто подобное. Смысл его рассказика (полунеприличного, полубогохульного, что тоже было неприятно) был ясен мне, ясен и всем присутствующим. Мы — изобретатели, ученые, инженеры, рабочие — сделали страшное оружие, самое страшное в истории человечества. Но использование его целиком будет вне нашего контроля. Решать («направлять», словами притчи) будут они — те, кто на вершине власти, партийной и военной иерархии. Конечно, понимать я понимал это и раньше. Не настолько я был наивен. Но одно дело — понимать, и другое — ощущать всем своим существом как реальность жизни и смерти. Мысли и ощущения, которые формировались тогда и не ослабевают с тех пор, вместе со многим другим, что принесла жизнь, в последующие годы привели к изменению всей моей позиции» [9, с. 270–271].

По сути, тост Неделина был вызовом автократии творцам научно-технического прогресса. Андрей Дмитриевич убедился в том, что его детище в руках узкой властолюбивой группы людей становится орудием распространения геополитического господства. И человечество должно быть счастливо, что этот вызов был принят человеком с громадной интеллектуальной мощью, высочайшими гуманистическими принципами, человеком совести и долга. Андрей Дмитриевич отдал все свои силы разработке путей выхода из создавшегося кризиса.

За создание настоящей водородной бомбы многие ее разработчики получили высокие награды. Сахаров был удостоен второй звезды Героя Социалистического Труда и вместе с Курчатовым, Харитоном и Зельдовичем — только что восстановленной Ленинской премии. На обороте их лауреатских значков — номера от одного до четырех. Третью звезду Героя Андрей Дмитриевич получил за испытания сверхмощной водородной бомбы в 1962 году на полигоне «Новая Земля» [7, с. 23].

[1] Неделин Митрофан Иванович (1902–1960) — Герой Советского Союза (1945). Главный маршал артиллерии (1959), с 1952 года — заместитель министра обороны.

Рассказ об Андрее Дмитриевиче в период создания водородной бомбы будет неполным и неточным, если не упомянуть о двух фундаментальных предложениях, которые он сделал в начале 50-х годов. Первое (1950) касается устройства для промышленного использования термоядерной энергии, которое в те годы именовалось магнитным термоядерным реактором, а сейчас известно под названием «токамак» [7, с. 25–33]. Другое предложение (1952) касается возникшей у него идеи магнитной кумуляции, перспективной для получения сверхсильных магнитных полей [7, с. 39–49].

Пробужденный тостом Неделина и не без влияния таких людей, как лауреат Нобелевской премии мира за 1952 год Альберт Швейцер (1875–1965) и дважды лауреат Нобелевской премии по химии за 1954 год и премии Мира за 1962 год Лайнус Полинг (1901–1994), Андрей Дмитриевич начал ощущать себя ответственным за радиоактивное заражение при ядерных испытаниях и с 1957 года стал активно выступать на различных совещаниях за прекращение испытаний ядерного оружия [8, с. 5]. Естественно, такая деятельность Сахарова не осталась вне внимания у власть имущих и вызвала у них сильное недовольство. В частности Н.С. Хрущев (1894–1971), выступая 10 июля 1961 года на банкете после встречи руководителей партии и правительства с учеными-атомщиками, резко осудил эту деятельность Андрея Дмитриевича: «Я получил записку от академика Сахарова, вот она. (Показывает.) Сахаров пишет, что испытания нам не нужны. <...> Тут он лезет не в свое дело. Можно быть хорошим ученым и ничего не понимать в политических делах. <...> Сахаров, не пытайтесь диктовать нам, политикам, что нам делать, как себя держать. Я был бы последний слюнтяй, а не Председатель Совета Министров, если бы слушался таких, как Сахаров». [9, с. 298–302]. И тем не менее, старания Андрея Дмитриевича увенчались успехом. В 1963 году Дж. Кеннеди (1917–1963) и Н.С. Хрущев в Москве подписали Договор о запрещении испытаний ядерного оружия в трех средах — в атмосфере, под водой и в космосе.

Большую роль сыграл Сахаров в победе над лысенковщиной. В 1964 году проходили выборы в Академию наук СССР. Т. Д. Лысенко (1898–1971) выдвинул в академики Н.И. Нуждина. При голосовании в Отделении биологии сработало лысенковское большинство. На этом этапе Нуждин прошел, получив 4 голоса «за» и 2 «против». Предстояли выборы на общем собрании академии. И тут физики дали решающий бой. Первым выступил представитель партгруппы Общего собрания, насчитывающей примерно 80–90 человек. Он заявил, что партгруппа рассмотрела итоги голосования по отделениям и решила голосовать за всех выдвинутых кандидатур. После выступили биолог В.А. Энгельгардт (1894–1984), А.Д. Сахаров, И.Е. Тамм, Т. Д. Лысенко, Я.Б. Зельдович.

Владимир Александрович в своем выступлении высказал соображения, по которым будет голосовать «против». Андрей Дмитриевич выступил очень резко и отрицательно. Приведем из текста стенограммы заседания Общего собрания заключительную часть его выступления: «Что касается меня, то я призываю всех присутствующих академиков проголосовать так, чтобы единственными бюллетенями, которые будут поданы «за», были бюллетени тех лиц, которые вместе с Нуждиным, вместе с Лысенко несут ответственность за те позорные, тяжелые страницы в развитии советской науки, которые в настоящее время, к счастью, кончаются (аплодисменты)». Выступление Игоря Евгеньевича было очень логичным, корректным и убедительным. Он также доказывал, что Нуждин не достоин избрания в академики. В защиту Нуждина выступил только Трофим Денисович, но он в основном критиковал Сахарова и не ответил на возражения, выдвинутые против Нуждина. Последним выступил Яков Борисович. Для такого случая он надел все три свои звезды Героя. Он также привел убедительные доводы, заставляющие его голосовать против Нуждина.

В результате из 137 академиков за Нуждина проголосовали только 23, остальные — против. Нуждин не прошел. По общему мнению, речь Сахарова сыграла решающую роль. Это было его первое гражданское выступление, которое можно расценивать как начало борьбы против попрания правды, чести и совести [7, с. 116–117]. По этому поводу сам Андрей Дмитриевич пишет: «Мое вмешательство в дело Нуждина, наряду с борьбой за прекращение наземных испытаний (хотя, конечно, проблема испытаний была существенней), — один из факторов, определивших мою общественную деятельность и судьбу» [9, с. 329].

Выступление на Общем собрании имело для Андрея Дмитриевича большое психологическое значение, а также расширило круг знакомых, с которыми он общался. В частности, он познакомился с братьями Жоресом и Роем Медведевыми. Прочел их «самиздатовские» книги.

1965–1967 годы стали для Сахарова периодом не только самой интенсивной научной работы, но и временем, когда он приблизился к разрыву с официальной позицией в общественных вопросах, к повороту в своей деятельности и судьбе. В 1966 году А.Д. Сахаров совместно с П.Л. Капицей, М.А. Леонтовичем, М.М. Плисецкой и 25-ю другими выдающимися деятелями науки и искусства подписал коллективное письмо, адресованное XXIII съезду КПСС о культе личности Сталина. В том же году он послал телеграмму Верховному Совету РСФСР о намечавшемся тогда законе, который открывал возможности широких преследований за убеждения (статья 190-1 УК РСФСР). В 1967 году Андрей Дмитриевич был вовлечен в еще одно общественное дело большого значения — проблему Байкала.

В январе 1968 года Андрей Дмитриевич начал писать статью «Размышления о прогрессе, мирном сосуществовании и интеллектуальной свободе», первый вариант которой он завершил в середине апреля. В ней он отразил свои мысли о самых важных вопросах, стоящих перед человечеством — о войне и мире, о диктатуре, о культе личности Сталина и свободе мысли, о демографических проблемах и загрязнении среды обитания, о роли, которую может сыграть наука, и научно-технический прогресс [8, с. 8]. И, самое главное, в ней была провозглашена великая идея конвергенции двух систем, т. е. идея сближения социализма и капитализма. Статья сразу стала достоянием «самиздата». Она была одобрена многими, но принята в «штыки» власть имущими. Через два месяца она попала в Голландию и 6 июля была опубликована в газете «Вечерний Амстердам». 22 июля статью опубликовала газета «Нью-Йорк Таймс». После этого начался поток публикаций. По данным Международной книжной ассоциации общий тираж публикаций статьи в 1968–1969 годах составил 18 миллионов экземпляров, на третьем месте после Мао Цзэ-дуна и Ленина и — на эти годы — впереди Ж. Сименона и А. Кристи [9, с. 399].

За опубликование статьи за рубежом Андрей Дмитриевич в конце 1968 года был официально отстранен от секретной работы. В 1969 году он вернулся в ФИАН старшим научным сотрудником и по общественной линии возглавил правозащитное движение в стране. О том, что стили мышления и поведения Сахарова были более чем своеобразными, свидетельствует и такой факт. В период между фактическим и формальным его отстранением от работы на «объекте» он большую часть своих сбережений — 139 тысяч рублей (более чем двадцатилетняя зарплата профессора — заведующего кафедрой) — перевел на строительство онкологической больницы и в фонд Красного Креста.

Правозащитная деятельность Сахарова состояла в том, что он посылал письма в различные советские инстанции, встречался с высокопоставленными чиновниками, обращался с призывами к западным ученым и политическим деятелям, в международные организации, сидел в залах судов, а после 1971 года — стоял у здания, где проходили процессы, приезжая для этого в отдаленные концы нашей страны. Он ездил в места ссылок, в Мордовские лагеря, объявлял голодовки, созывал пресс-конференции, давал интервью и писал, писал, писал — письма, обращения, статьи — все свои силы отдавая спасению людей. В этой тяжелой борьбе было мало побед и много поражений. Но он не отступал и не отступался [11, с. 261]. Более подробно с правозащитной деятельностью Андрея Дмитриевича можно познакомиться, если прочесть книги [3, 6–11].

9 октября 1975 года Нобелевский комитет норвежского Стортинга присудил Нобелевскую премию мира за 1975 год А.Д. Сахарову «за бесстрашную поддержку фундаментальных принципов мира между людьми» и «за мужественную борьбу со злоупотреблением властью и любыми формами подавления человеческого достоинства». Эта была первая Нобелевская премия Мира, присужденная гражданину СССР. Через 15 лет, в 1990 году, ею был награжден Президент СССР М.С. Горбачев.

Советская печать реагировала на присуждение Сахарову Нобелевской премии более чем отрицательно. Ему было отказано в выдаче выездной визы в Норвегию. За всю историю существования Нобелевской премии мира это был третий случай, когда лауреат не смог принять ее

А.Д. Сахаров с Э. Теллером («отцом американской водородной бомбы»). Вашингтон, ноябрь 1988 года

из рук норвежского короля. В 1935 году Гитлер воспрепятствовал отъезду в Осло известному немецкому пацифисту Карлу фон Осецкому (1889–1938), находящемуся в то время в концентрационном лагере. В 1961 году Нобелевская премия мира была присуждена погибшему 18 сентября 1961 года в авиакатастрофе генеральному секретарю ООН Дагу Хаммаршельду, и награду король Норвегии вручал его вдове. Нобелевскую премию А.Д. Сахарова приняла в Осло 10 декабря 1975 года его жена, Е.Г. Боннэр. Она же на следующий день прочитала текст Нобелевской лекции мужа «Мир, прогресс, права человека» [8, с. 50–62], в которой Сахаров показывает, что эти три понятия «неразрывно связаны между собой».

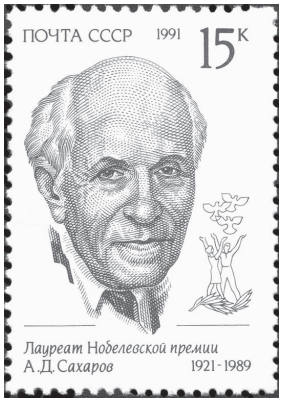
Апофеозом правозащитной деятельности Сахарова стал 1979 год, когда он выступил против ввода советских войск в Афганистан. Прошло несколько дней, и указом Президиума Верховного Совета СССР от 8 января 1980 года

А.Д. Сахаров на трибуне съезда народных депутатов СССР. Май 1989 года

Сахаров А.Д. был лишен звания Героя Социалистического Труда и всех имеющихся у него государственных наград СССР. А 22 января 1980 года он был выслан в город Горький, закрытый для посещения иностранцев. Ссылка в Горький продолжалась семь долгих лет, до 16 декабря 1986 года, когда М.С. Горбачев по телефону сообщил Сахарову об окончании ссылки. Годы горьковской ссылки подробно описаны в книгах [9, 10 и 14, с. 104–135].

В феврале 1987 года Андрей Дмитриевич выступил на Московском форуме «За безъядерный мир, за выживание человечества» с предложением рассматривать число евроракет отдельно от проблем СОИ, о сокращении армии, о безопасности атомных электростанций. В декабре этого же года он был назначен председателем Совета по космомикрофизике АН СССР, а также согласился войти в Совет директоров «Фонда выживания и развития». В июне 1988 года он выступил с докладом «Барионная асимметрия Вселенной» на конференции, посвященной 100-летию со дня рождения А.А. Фридмана, в августе его избрали почетным председателем общественного совета общества «Мемориал», в октябре — членом президиума АН СССР, в ноябре–декабре состоялась первая поездка Сахарова за границу, где он встречался с Р. Рейганом, Дж. Бушем, М. Тэтчер, Ф. Миттераном. Он также встретился с «отцом американской водородной бомбы» Эдвардом Теллером на его 80-летнем юбилее. Во время этой поездки Андрею Дмитриевичу была присуждена премия Мира имени Альберта Эйнштейна (Вашингтон). В марте 1989 года Андрей Дмитриевич был избран народным депутатом Верховного Совета СССР от Академии наук. Он разрабатывал свой вариант проекта Конституции.

Казалось бы, судьба снова была благосклонна к нему. Однако правозащитная деятельность и голодовки подорвали его здоровье. 14 декабря 1989 года в Москве у себя в квартире после напряженного дня работы на Съезде народных депутатов Андрей Дмитриевич скончался от сердечного приступа. Его сердце, как показало вскрытие, было полностью изношено. Проститься с ним пришли сотни тысяч человек.



Почтовая марка СССР, выпущенная к 70-летию со дня рождения

После смерти память об А.Д. Сахарове была увековечена во всем мире: в Страсбурге Европейский парламент основал премию имени А.Д. Сахарова, в Москве его именем назван проспект, в Вашингтоне — площадь, в Санкт-Петербурге на площади между Государственным оптическим институтом, Библиотекой Академии наук и Санкт-Петербургским государственным университетом ему поставлен памятник, площадь названа его именем. В Горьком (ныне Нижний Новгород) на Щербинке, в доме № 214 по проспекту Гагарина установлена мемориальная доска из черного мрамора с надписью: «В этом доме с 1980 по 1986 год жил, находясь в ссылке, лауреат Нобелевской премии Мира Андрей Дмитриевич Сахаров». Наконец, в 2001 году в Норвегии к 100-летнему юбилею со дня вручения первых Нобелевских премий была отчеканена серия из 20 серебряных медалей (диаметром 39 мм) с портретами лауреатов Нобелевских премий мира разных лет; среди них и медали с портретами А.Д. Сахарова (1975) и М.С. Горбачева (1990).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Академик Сахаров, А.Д.** Научные труды [Текст]: Сборник/ А.Д. Сахаров. — М.: АОЗТ «Изд-во ЦентрКом», 1995. — 528 с.

2. **Цукерман, В.А.** Академик Андрей Дмитриевич Сахаров [Текст]: Сборник «Люди и взрывы» / В.А. Цукерман, З.М. Азарх. — Арзамас-16: ВНИИЭФ, 1991. — 157 с.

3. Андрей Дмитриевич: воспоминания о Сахарове [Текст]: Сборник / ред.-сост. Т.И. Иванова. — М.: Терра, «Книжное обозрение», 1991. — 368 с.

4. **Мусский, С.А.** 100 великих Нобелевских лауреатов [Текст]: / С.А. Мусский. — М.: «Вече», 2003. — С. 158 — 162.

5. **Горюнов, И.** Русская слойка [Текст]/ И. Горюнов // Поиск.— 2004.— № 1. — С. 12.

6. Он между нами жил... Воспоминания о Сахарове [Текст]: Сборник/ Ред. коллегия: Б.Л. Альтшуллер, Б.М. Болотовский, И.М. Дремин, Л.В. Келдыш (предс.) [и др.]. — М.: ОТФ ФИАН — «Практика», 1996. — 943 с.

7. Специальный выпуск, посвященный А.Д. Сахарову [Текст]/ Гл. ред. акад. А.Ф. Андреев // Природа.— 1990. — № 8. — 131 с.

8. **Сахаров, А.Д.** Мир, прогресс, права человека [Текст]: Статьи и выступления/ А.Д. Сахаров. — Л.: Советский писатель, 1990. — 128 с.

9. **Сахаров, А.Д.** Воспоминания [Текст]: в 2 тт. Т. 1. / А.Д. Сахаров.— М.: «Права человека». — 1996. — 912 с.

10. **Сахаров, А.Д.** Воспоминания [Текст]: в 2 тт. Т. 2. / А.Д. Сахаров. — М.: «Права человека». — 1996. — 864 с.

11. Сахаровский сборник. 1981 [Текст]: репр. издание /сост. А. Бабенышев, Р. Лерт, Е. Печуро. — М.: Книга, 1991. — 351 с.

12. Сахаров Андрей Дмитриевич [Текст] // Энциклопедия «Лауреаты Нобелевской премии»: М — Я : Пер. с англ. — М.: Прогресс, 1992. — С. 362 — 365.

13. Сахаров Андрей Дмитриевич (1921 — 1989) [Текст]//«Все обо всем»: Научно-популярное изд. Т. 3 /сост. Г.П. Шалаева, Л.В. Кашинская. — М.: Филол. общ-во «Слово», Компания «Ключ-С», АСТ. — 1997. — С. 367 — 370.

14. **Фейнберг, Е.Л.** Эпоха и личность. Физики [Текст]: Очерки и воспоминания / Е.Л. Фейнберг. — М.: Наука, 1999. — 302 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

АКИМОВ Алексей Иванович — *кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры информатики Оренбургского государственного педагогического университета.*
460051 г. Оренбург, пр. Гагарина, 1
(3532) 33-27-89
akimov_ia@mail.ru

БЫКОВ Андрей Михайлович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий Лабораторией астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 292-73-26
byk@astro.ioffe.ru

ВЕРХОВЦЕВ Алексей Валерьевич — *аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
verkhovtsev@physics.spbstu.ru

ГАНИН Павел Георгиевич — *кандидат технических наук, доцент кафедры медицинской биотехнологии Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник кафедры микробиологии Санкт-Петербургской государственной химико-фармацевтической академии.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 328-33-02
ganin-pavel@rambler.ru

ГЛАДИЛИН Петр Евгеньевич — *аспирант Лаборатории астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, младший научный сотрудник Межфакультетской научной лаборатории астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)292-71-80
peter.gladilin@gmail.com

ГОЛОВИЦКИЙ Александр Петрович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-61-27
alexandergolovitski@yahoo.com

ГРОМОВ Виктор Евгеньевич — *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики Сибирского государственного индустриального университета.*
654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
(3843) 78-43-66
gromov@physics.sibsiu.ru

ГУСТОВ Максим Юрьевич — *старший разработчик программного обеспечения ООО Ф-Лайн Софтвер.*
197101, г. Санкт-Петербург, ул. Большая Монетная, 16
(812) 292-71-80
juliett.k@gmail.com

ЕЛИЗАРОВА Марина Владиславовна — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
meliz1@yandex.ru

ЕМЕЛЬЯНОВ Виктор Михайлович — *аспирант Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-21-73
resso2003@bk.ru

ЖГУТОВ Владимир Михайлович — *кандидат технических наук, докторант кафедры технологии, организации и экономики строительства Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 535-79-92
abc_kitezht@mail.ru

ЗЕГРЯ Георгий Георгиевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
zegrya@theory.ioffe.ru

ЗЕЛИКМАН Марк Аронович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-77-90
marzelik@mail.ru

ИВАНОВ Вадим Константинович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
ivanov@tuexph.stu.neva.ru

ИВАНОВ Юрий Федорович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Томского государственного архитектурно-строительного университета.*

634003, г. Томск, Соляная пл., 2
(8-382-2) 65-42-65
gromov@physics.sibsiu.ru

КАЛЮЖНЫЙ Николай Александрович — *научный сотрудник Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-21-73
nickk@mail.ioffe.ru

КЕСАМАНЛЫ Фагам Паша оглы — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31

КОЗЛОВ Владимир Николаевич — *доктор технических наук, проректор университета по УМО, профессор кафедры системного анализа и управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-80-75
umo@citadel.stu.neva.ru

КОНОВАЛОВ Сергей Валерьевич — *кандидат технических наук, доцент кафедры физики Сибирского государственного индустриального университета.*

654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
(3843) 78-43-67
konovalov@physics.sibsiu.ru

КОРОЛЬ Андрей Владимирович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета.*

190008, г. Санкт-Петербург, Лоцманская ул., 3
(812) 495-02-07.
a.korol@fias.uni-frankfurt.de

КРАСИЛЬЩИКОВ Александр Михайлович — *кандидат физико-математических наук, заместитель заведующего лабораторией МФНЛ Астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник Лаборатории астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
(812) 292-71-80
kra@astro.ioffe.ru

КРИВЦУН Александр Михайлович — *аспирант кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.*

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
(4162)39-46-82
a.krivtcun@gmail.com

КРОПОТИНА Юлия Андреевна — *заведующая лабораторией кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, стажер-исследователь Лаборатории астрофизики высоких энергий Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 292-71-80
juliett.k@gmail.com

ЛАНТРАТОВ Владимир Михайлович — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-21-73
Lantr@scell.ioffe.ru

ЛЕВЕНФИШ Ксения Петровна — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник сектора теоретической астрофизики Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 292-73-26

МИНТАИРОВ Михаил Александрович — *аспирант Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-21-73
mamint@mail.ioffe.ru

МИНТАИРОВ Сергей Александрович — *научный сотрудник Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-21-73
mintairov@scell.ioffe.ru

МИРОНОВ Владимир Олегович — *аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
vladimir.mironov@gmail.com

НАЙДЕНОВ Виктор Олегович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий Циклотронной лабораторией Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-71-71
alex-n10@yandex.ru

НГУЕН ВАН ТХАНГ — *аспирант кафедры общей физики института международных образовательных программ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., 28
(812) 324-03-39
thangspbstu@mail.ru

НЕВСКИЙ Сергей Андреевич — *аспирант кафедры физики Сибирского государственного индустриального университета.*

654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
(3843) 78-43-67
nevskiy_sa@physics.sibsiu.ru

НЕМОВ Сергей Александрович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-95-16
nemov_s@mail.ru

НЕСТЕРЕНОК Александр Владимирович — *аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, младший научный сотрудник Межфакультетской научной лаборатории астрофизических объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 292-71-80
alex-n10@yandex.ru

ОРЛЕНКО Федор Евгеньевич — *аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
fadler@mail.ru

ОСИПОВ Сергей Михайлович *кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Межфакультетской научной лаборатории астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)292-71-80.
osm2004@mail.ru

ПАВЛОВ Георгий Георгиевич — *кандидат физико-математических наук, заведующий Межфакультетской научной лаборатории астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, профессор Пенсильванского государственного университета, США.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(814)865-94-82
pavlov@astro.psu.edu

ПЛЕТНЕВ Александр Александрович — *ассистент кафедры «Компьютерные технологии и эксперимент в теплофизике» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 294-42-76
AAPletnev@yandex.ru

ПОЛОЗКОВ Роман Григорьевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
polozkov@tuexph.stu.neva.ru

ПОЦЕЛУЕВ Кирилл Андреевич — *аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-77-90
poc-kira@mail.ru

САЖИН Сергей Степанович — *кандидат физико-математических наук, профессор университета г. Брайтона, Великобритания*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

СЕТЕЙКИН Алексей Юрьевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.*
675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
(4162)39-46-82
seteikin@mail.ru

СКЛЯРОВА Елена Михайловна — *научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-73-39
sklyarova.mhd@mail.ioffe.ru

СНЕГИРЁВ Александр Юрьевич — *доктор технических наук, профессор кафедры «Компьютерные технологии и эксперимент в теплофизике» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

СОЛОВЬЁВ Андрей Владимирович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
solovyov@fias.uni-frankfurt.de

ТАЛАЛОВ Виктор Алексеевич — *кандидат технических наук, заведующий кафедрой «Компьютерные технологии и эксперимент в теплофизике» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

ТРОФИМОВ Павел Александрович — *аспирант кафедры математического анализа Оренбургского государственного педагогического университета.*
460051 г. Оренбург, пр. Гагарина, 1
(3532) 33-27-89
fizmattrofimov@mail.ru

ФИЛИППОВ Станислав Ильич — *студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-95-16
stanislav.filippov@gmail.com

ЧАРИКОВ Юрий Евгеньевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 292-71-67
y.charikov@yandex.ru

ШВАРЦ Максим Зиновьевич — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Лаборатории фотоэлектрических преобразователей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-73-94
Shvarts@scell.ioffe.ru

ШМИДТ Александр Александрович — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий сектором численного моделирования ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 558-73-44
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru

АННОТАЦИИ

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Быков А. М., Гладилин П. Е., Осипов С. М., Павлов Г. Г. НОВЫЙ КЛАСС ГАЛАКТИЧЕСКИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ИСТОЧНИКОВ КАК РЕЗУЛЬТАТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗВЕЗДНОГО ВЕТРА С ОСТАТКОМ СВЕРХНОВОЙ ЗВЕЗДЫ.

Рассмотрена модель ускорения частиц в окрестности расширяющегося остатка сверхновой и молодой массивной звезды с мощным звездным ветром. Показано, что на определенных фазах эволюции данный класс нетепловых источников характеризуется аномально жесткими спектрами рентгеновского и гамма-излучения.

МЕЖЗВЕЗДНАЯ СРЕДА. ОСТАТКИ СВЕРХНОВЫХ ЗВЕЗД. УСКОРЕНИЕ ЧАСТИЦ НА УДАРНЫХ ВОЛНАХ. ЗВЕЗДНЫЙ ВЕТЕР.

Верховцев А. В., Полозков Р. Г., Иванов В. К., Король А. В., Соловьёв А. В. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ.

Представлены результаты впервые реализованного самосогласованного расчета электронной структуры эндоэдральных фуллеренов, выполненного в рамках приближения Хартри — Фока, на примере комплексов $He@C_{60}$, $Ne@C_{60}$ и $Ar@C_{60}$. Проведено исследование влияния обменного межэлектронного взаимодействия на гибридизацию орбиталей эндофуллеренов.

ЭНДОФУЛЛЕРЕН. ИНЕРТНЫЙ ГАЗ. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ–ФОКА. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЦЕНТРАЛЬНОГО ПОЛЯ. ЖЕЛЕ-МОДЕЛЬ. ОРБИТАЛЬ. ГИБРИДИЗАЦИЯ.

Ганин П. Г., Шмидт А. А. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДИАМЕТРА КАПЕЛЬ, ОБРАЗОВАННЫХ ПРИ ДРОБЛЕНИИ НАИБОЛЬШИХ КАПЕЛЬ В АППАРАТЕ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ.

В системе типа жидкость — жидкость с механическим перемешиванием механизм образования мелкодисперсной фракции капель не имеет исчерпывающего теоретического объяснения. В работе приведена теоретическая оценка диаметра наименьших дочерних капель, образованных в аппарате при дроблении наиболее крупных капель полидисперсной эмульсии.

ЯДРО ТУРБУЛЕНТНОГО ПОТОКА. ДРОБЛЕНИЕ КАПЕЛЬ. МЕЛКОДИСПЕРСНАЯ ФРАКЦИЯ. МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ.

Головицкий А. П. СЛАБОТОЧНЫЙ ТЛЕЮЩИЙ РАЗРЯД НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНЫХ ГАЗАХ.

Проанализированы физические механизмы существования двух стадий тлеющего разряда в электроотрицательных газах. Показано, что на слаботочной стадии разряда главным механизмом гибели электронов является их прилипание к молекулам электроотрицательного газа, а на сильноточной стадии — диффузионное устранение.

ТЛЕЮЩИЙ РАЗРЯД. ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ГАЗЫ. ПРИЛИПАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ.

Елизарова М. В., Миронов В. О. ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ СГЛАЖИВАНИЯ ДОЗИМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПРИ ИНСТАЛЛЯЦИИ СИСТЕМ ПЛАНИРОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ.

В статье рассмотрены погрешности сглаживания дозиметрических данных на этапе их инсталляции в систему планирования дистанционной лучевой терапии. Проведена параметризация и количественная оценка погрешностей. Даны практические рекомендации по проведению процедуры сглаживания дозиметрических экспериментальных данных.

ДОЗИМЕТРИЯ ФОТОННЫХ ПУЧКОВ. АЛГОРИТМЫ СГЛАЖИВАНИЯ. ЛУЧЕВАЯ ТЕРАПИЯ. СИСТЕМА ПЛАНИРОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ. АНАЛИЗ ПОГРЕШНОСТИ.

Емельянов В. М., Калюжный Н. А., Минтаиров М. А., Минтаиров С .А., Шварц М. З., Лантратов В. М. ОПТИМИЗАЦИЯ КОНЦЕНТРАТОРНЫХ ТРЕХПЕРЕХОДНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.

Исследовано влияние параметров эпитаксиальной структуры каскадных солнечных элементов GaInP/GaInAs/Ge на эффективность преобразования концентрированного солнечного излучения. Показано, что оптимальный выбор толщин и уровней легирования эмиттеров субэлементов GaInP и GaInAs позволяет повысить кпд солнечных элементов до 4 %.

СОЛНЕЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ. КАСКАДНЫЙ. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ОПТИЧЕСКИЙ КОНЦЕНТРАТОР. ХРОМАТИЧЕСКАЯ АБЕРРАЦИЯ. ОПТИМИЗАЦИЯ. ЭПИТАКСИАЛЬНАЯ СТРУКТУРА.

Жгутов В. М. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, АЛГОРИТМ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ УПРУГИХ РЕБРИСТЫХ ОБОЛОЧЕК ПРИ КОНЕЧНЫХ ПРОГИБАХ.

Предложены математические модели деформирования и алгоритм исследования устойчивости упругих ребристых оболочек при учете геометрической нелинейности, сдвиговой и крутильной жесткостей ребер, поперечных сдвигов. Приведены примеры решений для оболочек, выполненных из металла, оргстекла и железобетона. Определены критические нагрузки, соответствующие упругому поведению материала.

УПРУГИЕ РЕБРИСТЫЕ ОБОЛОЧКИ. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ НЕЛИНЕЙНОСТЬ. СДВИГОВАЯ И КРУТИЛЬНАЯ ЖЕСТКОСТИ РЕБЕР. ПОПЕРЕЧНЫЕ СДВИГИ. УСТОЙЧИВОСТЬ. КРИТИЧЕСКАЯ НАГРУЗКА.

Зеликман М. А., Поцелуев К. А. ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА НА МЕЙССНЕРОВСКОЕ СОСТОЯНИЕ В ТРЕХМЕРНОЙ УПОРЯДОЧЕННОЙ ДЖОЗЕФСОНОВСКОЙ СРЕДЕ.

Получена система разностных уравнений, основанная на условиях квантования флюксоида в ячейках. Предложен метод решения системы для мейсснеровской конфигурации при любых значениях параметров. Рассчитаны токовые конфигурации, а также значения критических полей, выше которых мейсснеровская конфигурация не существует.

ГРАНУЛИРОВАННЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ. ТРЕХМЕРНАЯ УПОРЯДОЧЕННАЯ ДЖОЗЕФСОНОВСКАЯ СРЕДА. ЭФФЕКТ МЕЙССНЕРА. УСЛОВИЯ КВАНТОВАНИЯ ФЛЮКСОИДА.

Иванов Ю. Ф., Невский С. А., Коновалов С. В., Громов В. Е. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ПРОЦЕСС ПЕРЕСТРОЙКИ ДИСЛОКАЦИОННЫХ СУБСТРУКТУР АЛЮМИНИЯ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ.

Методами просвечивающей дифракционной электронной микроскопии проведено исследование образцов алюминия, подвергнутых испытанию на релаксацию напряжений, как в обычных условиях, так и при наложении электрического потенциала. Выявлено существенное изменение параметров дислокационной субструктуры.

АЛЮМИНИЙ. РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ. ДИСЛОКАЦИОННАЯ СУБСТРУКТУРА. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ. ИЗГИБНЫЙ ЭКСТИНКЦИОННЫЙ КОНТУР.

Козлов В. Н., Трофимов П. А., Акимов А. И. ОБРАТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ХАНКЕЛЯ ДЛЯ СМЕШАННОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ НА КОНЕЧНОМ ИНТЕРВАЛЕ.

Получена формула обратного преобразования Ханкеля для смешанной краевой задачи для условий первого и третьего рода. Рассмотрена связь с решением смешанной задачи для условий первого рода.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ХАНКЕЛЯ. ФУНКЦИИ БЕССЕЛЯ. ЯДРО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ. ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ.

Кривцун А. М., Сетейкин А. Ю. АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ.

В работе рассмотрен ряд вопросов, возникающих при решении задачи расчета распространения оптического излучения в биологических средах. Получены результаты моделирования для сред с различным набором оптических параметров. Представлен подход для повышения вычислительной эффективности используемого метода.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. ВОКСЕЛЬ. ОПТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ СРЕДЫ. РАССЕЯНИЕ. ФОТОН. СТАТИСТИЧЕСКИЙ ВЕС.

Кропотина Ю. А., Густов М. Ю., Красильщиков А. М., Левенфиш К. П., Павлов Г. Г. МНОГОПРОЦЕССОРНЫЙ ТРЕХМЕРНЫЙ ГИБРИДНЫЙ КОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЕ.

Представлена авторская разработка многопроцессорного трехмерного гибридного кода с сохранением дивергенции магнитного поля. Код позволяет эффективно моделировать бесстолкновительные процессы в плазме, происходящие на масштабах порядка ионных гирорадиусов. Приводится пример использования кода для моделирования резонансной электромагнитной ион-ионной неустойчивости.

ГИБРИДНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. АСТРОФИЗИЧЕСКАЯ ПЛАЗМА. БЕЗДИВЕРГЕНТНЫЙ АЛГОРИТМ. ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ.

Нгуен Ван Тханг. СИЛЫ И МОМЕНТЫ, ДЕЙСТВУЮЩИЕ НА РОТОР В УПОРНОМ ПОДШИПНИКЕ СКОЛЬЖЕНИЯ, С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИКИ СМАЗКИ И ЦЕНТРОБЕЖНЫХ СИЛ.

В статье рассмотрены проблемы теоретического представления вопросов сил и моментов, действующих на ротор с учетом центробежных сил и гидродинамики смазки. Изложены основные результаты применительно к исследованию короткого подшипника.

ЦЕНТРОБЕЖНЫЕ СИЛЫ. УСТОЙЧИВОСТЬ. УРАВНЕНИЕ РЕЙНОЛЬДСА. МОМЕНТ. КОРОТКИЙ ПОДШИПНИК.

Немов С. А., Филиппов С. И. РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ ОЛОВА В ТЕЛЛУРИДЕ ВИСМУТА ПО ДАННЫМ ЭФФЕКТА ХОЛЛА.

На основе экспериментальной температурной зависимости коэффициента Холла в двухзонной модели рассчитаны химический потенциал дырок и энергия двухэлектронных примесных состояний олова в теллуриде висмута, легированном оловом и йодом, в диапазоне температур 77–330 K. Оценены температурный коэффициент смещения двухэлектронного уровня олова относительно вершины валентной зоны, а также величина энергии Хаббарда.

ЭФФЕКТ ХОЛЛА. ТЕЛЛУРИД ВИСМУТА. ОЛОВО. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ЭНЕРГИЯ. ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ. $A^{V}B^{VI}$.

Нестеренок А. В., Найденов В. О. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНО-АКТИВНОЙ КОМПОНЕНТЫ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ.

Работа посвящена статистическому моделированию процессов распространения каскадов частиц вторичного космического излучения и их взаимодействия с атмосферой Земли. Приведены результаты расчета интегральных и дифференциальных потоков частиц ядерно-активной компоненты космического излучения. Проводится сравнение результатов расчетов с данными измерений.

КОСМИЧЕСКИЕ ЛУЧИ. ЯДЕРНО-АКТИВНАЯ КОМПОНЕНТА. КОСМОГЕННЫЕ НУКЛИДЫ. АТМОСФЕРА. ЗЕМЛЯ.

Орленко Ф. Е., Зегря Г. Г. ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК — МЕТАЛЛ В НЕМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ АНТИМОНИДА ИНДИЯ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

Получен гамильтониан обменного взаимодействия для частиц со спином 3/2 и найдены возможные значения энергии парного взаимодействия. Основное антиферромагнитное состояние вырождено по полному спину пары акцепторов. Вырождение снимается сильным магнитным полем, индуцирующим переход в магнитное и одновременно в проводящее состояние.

ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ. СПИН 3/2. ФРАГМЕНТАЦИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ. СНЯТИЕ ВЫРОЖДЕНИЯ. МАГНИТНОЕ ПОЛЕ. ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК — МЕТАЛЛ.

Плетнев А. А., Талалов В. А. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ВАННЕ ШЛАКОВОГО РАСПЛАВА МНОГОЭЛЕКТРОДНОЙ РУДНОТЕРМИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОПЕЧИ.

Разработана математическая модель и экономичный вычислительный алгоритм для описания тепломассообменных процессов, происходящих в шлаковой ванне прямоугольной многоэлектродной рудно-термической электропечи. Выполнен расчетный анализ режимов плавки при работе печи на повышенной удельной мощности.

РУДНОТЕРМИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОПЕЧЬ. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ. ШИХТА. ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПЛАВКИ.

Снегирёв А. Ю., Сажин С. С., Талалов В. А. МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ТЕПЛООБМЕНА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ДИСПЕРГИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ.

Сформулирована модель нестационарного и неизотермического испарения капель диспергированной жидкости с учетом неравномерного поля температуры внутри капли и циркуляции жидкости в ней. Построен экономичный и абсолютно устойчивый алгоритм, предназначенный для использования при численном моделировании турбулентных газокапельных струй.

ИСПАРЕНИЕ КАПЛИ. ГАЗОКАПЕЛЬНАЯ СТРУЯ. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. ДИСПЕРГИРОВАННАЯ ЖИДКОСТЬ.

Чариков Ю. Е., Склярова Е. М. КОНЦЕПЦИЯ ПРИРОДЫ ТЕПЛОВЫХ ВСПЫШЕК НА СОЛНЦЕ.

Сформулированы основные положения концепции природы тепловых вспышек на Солнце, генерирующих рентгеновское излучение в диапазоне 1–8 Å мощностью не выше 10^{-5} Вт/м^2. Результаты анализа данных по вспышке 05.07. 2009 года полностью подтверждают предложенную концепцию.

СОЛНЦЕ. СОЛНЕЧНАЯ АКТИВНОСТЬ. ВСПЫШКИ. РЕНТГЕНОВСКИЕ ЛУЧИ. ВРЕМЕННАЯ СТРУКТУРА.

ABSTRACTS

KEYWORDS

Bykov A. M., Gladilin P. E., Osipov S. M., Pavlov G. G. A NEW CLASS OF GALACTIC X-RAY SOURCES RESULTING FROM INTERACTION OF STELLAR WIND WITH A SUPERNOVA REMNANT.

A model of energetic particle acceleration in the vicinity of expanding supernova shell and of young massive star having powerful stellar wind has been considered. The source was shown to be characterized by unusually hard spectral energy distribution in X- and gamma-ray energy bands.

INTERSTELLAR MEDIUM. SUPERNOVA REMNANTS. PARTICLES ACCELERATION AT SHOCK WAVES. STELLAR WIND.

Charikov Yu. E., Sklyarova E. M. THE CONCEPT OF THE ORIGIN OF THERMAL FLARES ON THE SUN.

The paper formulates the main items underlying the concept of the origin of thermal flares on the Sun which generate X-rays in the 1—8 Å range with a power not above 10^{-5} Вт/м^2. An analysis of the data amassed for the 0.5.07.2009 flare provides convincing support for the concept proposed.

SUN. SOLAR ACTIVITY. FLARES. X-RAYS. TEMPORAL STRUCTURE.

Elizarova M. V., Mironov V. O. AN ESTIMATION OF INACCURACY IN DOSIMETRIC DATA SMOOTHING WHEN INSTALLING THE REMOTE RADIATION THERAPY PLANNING SYSTEM.

Smoothing errors of dosimetric data due to preparation for radiation therapy treatment planning system are considered. Parametrization and numeric estimation of those errors are performed. Practical recommendations concerning smoothing procedure during experimental dosimetric data preparation are given.

PHOTON BEAMS DOSIMETRY. SMOOTHING ALGORITHMS. RADIATION THERAPY. REMOTE RADIATION TREATMENT PLANNING SYSTEM. ERROR ANALYSIS.

Emelyanov V. M., Kalyuzhniy N. A., Mintairov M. A., Mintairov S. A., Shvarts M. Z., Lantratov V. M. OPTIMIZATION OF THE CONCENTRATOR THREE-JUNCTIONAL SOLAR CELLS.

The influence of epilayer structure parameters of tandem GaInP/GaInAs/Ge solar cells on sunlight conversion efficiency has been investigated. The optimal choice of thicknesses and doping levels of emitters of GaInP and GaInAs subcells were shown to allow to improve efficiency of the solar cells up to 4 %.

SOLAR CELL. MULTIJUNCTION. SIMULATION. OPTICAL CONCENTRATOR. CHROMATIC ABERRATION. OPTIMIZATION. EPILAYER STRUCTURE.

Ganin P. G., Schmidt A. A. THEORETICAL ESTIMATION OF THE DIAMETER OF THE DROPLETS FORMED IN A BREAKUP OF THE LARGEST DROPLETS IN THE PROCESS VESSEL WITH STIRRING.

In a liquid-liquid system with mechanical stirring a mechanism of fine droplets fraction formation doesn't have complete theoretical explanation. The paper presents a theoretical estimation of a diameter of the smallest daughter droplets formed in the process vessel in a breakup of largest droplets of polydispersed emulsion.

CORE OF TURBULENT FLOW. BREAKUP OF DROPLETS. FINE FRACTION. MECHANISM OF FORMATION.

Golovitski A. P. THE LOW-CURRENT LOW-PRESSURE GLOW DISCHARGE IN THE ELECTRONEGATIVE GASES.

The physical mechanisms of the existence of two stages of glow discharge in the electronegative gases have been analysed. The electron attachment is shown to be the main mechanism of electron decay at the low-current stage, whereas the diffusion-aided removing — to be that at the high-current stage.

GLOW DISCHARGE. ELECTRONEGATIVE GASES. ELECTRON ATTACHMENT. PLASMA MODELING.

Ivanov Yu. F., Nevskiy S. A., Konovalov S. V., Gromov V. E. THE INFLUENCE OF ELECTRICAL POTENTIAL ON CHANGING A DISLOCATION SUBSTRUCTURE OF ALUMINIUM AT A STRESS RELAXATION.

Aluminium samples tested for stress relaxation both under normal conditions and under electrical potential have been investigated using transmission diffraction electron microscopy. An essential change of dislocation substructure parameters was revealed.

ALUMINIUM. STRESS RELAXATION. DISLOCATION SUBSTRUCTURE. ELECTRICAL POTENTIAL. FLEXURAL EXTINCTION COUNTOUR.

Kozlov V. N., Trofimov P. A., Akimov A. I. THE INVERSE HANKEL TRANSFORMATION FOR THE MIXED BOUNDARY VALUE PROBLEM IN THE CLOSED INTERVAL.

The formula of the inverse Hankel transformation for the mixed boundary value problem for requirements of the first and the third sort is gained. Connection with a solution of the mixed problem for requirements of a first labour is considered.

HANKEL TRANSFORM. BESSEL FUNCTIONS. TRANSFORMATION KERNEL. BOUNDARY CONDITION. THERMAL CONDUCTIVITY.

Krivtsun A. M., Seteikin A. Yu. AN ANALYSIS OF LIGHT PROPAGATION PROCESS IN BIOLOGICAL MEDIA USING GRAPHICS PROCESSING UNITS TECHNIQUE.

A number of issues arising when solving task of numerical simulating of light propagation process has been considered. Numerical results for media with different sets of optical properties are presented and validated against other groups. A new approach towards increasing of calculating performance is presented.

MONTE-CARLO METHOD. VOXEL. OPTICAL PROPERTIES. SCATTERING. PHOTON. STATISTICAL WEIGHT.

Kropotina J. A., Gustov M. Yu., Krassilchtchikov A. M., Levenfish K. P., Pavlov G. G. MULTIPROCESSOR 3D-HYBRID CODE FOR ASTROPHYSICAL PLASMA MODELING.

An original multiprocessor 3D divergence-free hybrid code is presented. The code allows for efficient modeling of collisionless processes in plasma on the scale of ion gyroradii. An example of resonant electromagnetic ion-ion instability simulation is provided.

HYBRID MODELING. ASTROPHYSICAL PLASMA. DIVERGENCE-FREE ALGORITHM. PARALLEL PROGRAMMING.

Nemov S. A., Filippov S. I. CALCULATION OF PARAMETERS OF TIN IMPURITY STATES IN BISMUTH TELLURIDE USING THE HALL EFFECT DATA.

Basing on experimental temperature dependence of the Hall factor in telluride bismuth crystal doped with tin and iodine, chemical potential of holes and energy of two-electron impurity states of tin have been calculated within framework of two-band model at the temperature range of 77–330 K. Coefficient of temperature drift of tin two-electron level relatively the top of the valence band and value of Hubbard energy were estimated.

HALL EFFECT. BISMUTH TELLURIDE. TIN. CORRELATION ENERGY. IMPURITY STATES. $A^{V}B^{VI}$.

Nesterenok A. V., Naidenov V. O. THE SIMULATION OF PROPAGATION OF COSMIC RAYS NUCLEONIC COMPONENT IN THE EARTH'S ATMOSPHERE.

The paper is devoted to statistical simulation of propagation processes of secondary cosmic rays and its interaction with the Earth's atmosphere. We present the simulation results of integral and differential fluxes of cosmic rays nucleons. The comparison between our results and experimental data is done.

COSMIC RAYS. NUCLEONIC COMPONENT. COSMOGENIC NUCLIDES. ATMOSPERE. EARTH.

Nguyen Van Thang. FORCES AND MOMENTS ACTING ON A RAPIDLY ROTATING FLOATING BEARING WITH ALLOWANCE OF LUBRICATION HYDRODYNAMICS AND CENTRIFUGAL FORCE.

The problems of theoretical representation of questions of forces and moments acting on a rapidly rotating floating bearing with allowance of centrifugal force and oil hydrodynamics. The basic results are given with reference to research of short bearing.

CENTRIFUGAL FORCES. STABILITY. REYNOLD'S EQUATIONS. MOMENT. SHORT BEARING.

Orlenko F. E., Zegrya G. G. METAL — INSULATOR TRANSITION IN A NONMAGNETIC InSb CRYSTAL SEMICONDUCTOR IN THE MAGNETIC FIELD.

A Hamiltonian of the exchange interaction in the spin representation is developed for the couples of particles with spins equal to 3/2. The ground antiferromagnetic state is degenerated in respect to the total spin of the acceptor couple. The degeneracy is removed by a strong magnetic field that induces a transition into a magnetic and (at the same time) a conducting state.

HAMILTONIAN OF PARTICLE SYSTEM. SPIN OF 3/2. GROUND STATE FRAGMENTATION. REMOVAL OF DEGENERACY. MAGNETIC FIELD. INSULATOR — METAL TRANSITION.

Pletnev A. A., Talalov V. A. MATHEMATICAL MODEL OF HEAT AND MASS TRANSFER IN THE ELECTRIC FURNACE MOLTEN SLAG BATH.

Both mathematical model and economical calculation algorithm for numerical simulation of the heat and mass transfer processes in the molten slag bath of the rectangular electric smelting furnace have been carried out. The high intensive operational conditions of the furnace are investigated.

ELECTRIC SMELTING FURNACE. MATHEMATICAL MODEL. CHARGE. INTENSIFICATION OF MELTING PROCESS.

Snegirev A. Yu., Sazhin S. S., Talalov V. A. A MODEL AND COMPUTATIONAL ALGORITHM FOR HEAT EXCHANGE AND EVAPORATION OF DROPLETS OF DISPERSED LIQUID.

The model of unsteady nonisothermal droplet vaporization of atomized liquid is formulated, taking into account the temperature gradient and liquid recirculation inside the droplet. An efficient and absolutely stable algorithm is developed for further use in numerical simulations of turbulent evaporating sprays.

DROPLET EVAPORATION. LIQUID SPRAY. SIMULATION. LIQUID DISPERSED.

Verkhovtsev A. V., Polozkov R. G., Ivanov V. K., Korol A. V., Solov'yov A. V. AN INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF NOBLE GAS ENDOHEDRAL FULLERENES.

The results of the first self-consistent calculation of the electronic structure of endohedral compounds $He@C_{60}$, $Ne@C_{60}$ and $Ar@C_{60}$ within the Hartree–Fock approximation are presented. The influence of the exchange electron-electron interaction on the hybridization process is studied.

ENDOHEDRAL FULLERENE. NOBLE GAS. HARTREE–FOCK APPROXIMATION. CENTRAL FIELD APPROXIMATION. JELLIUM MODEL. ORBITAL. HYBRIDIZATION.

Zelikman M. A., Potseluev K. A. THE INFLUENCE OF STRUCTURAL FACTOR ON THE MEISSNER STATE IN THE 3D-ORDERED JOSEPHSON MEDIUM.

The system of difference equations based on the conditions of fluxoid quantization in the cells is obtained. A method of solutions of the system for the Meissner configuration for all values of parameters is proposed. The current configurations as well as the critical field above which the Meissner configuration does not exist are calculated.

GRANULATED SUPERCONDUCTORS. 3D-ORDERED JOSEPHSON MEDIUM. MEISSNER EFFECT. CONDITIONS OF FLUXOID QUANTIZATION.

Zhgoutov V. M. MATHEMATICAL MODELS, THE RESEARCH ALGORYTHM AND THE RIBBED SHELLS STEADINESS ANALYSIS AT FINITE BENDING FLEXURE.

The mathematical deformation models and the algorithm of the elastic ribbed shells research accounting geometrical nonlinearity, shifting and bending rigidity of the ribs, and the transverse shifts are proposed. The examples of the solutions for the metal, organic-glass and concrete shells are given. The critical load for the elastic behavior of the material is estimated.

ELASTIC RIBBED SHELLS. GEOMETRICAL NONLINEARITY. SHIFTING AND BENDING RIGIDITY OF THE RIBS. TRANSVERSE SHIFTS. STEADINESS. CRITICAL LOAD.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

№ 1 (116) 2011

Серия «Физико-математические науки»

Учредитель – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Издание зарегистрировано в Госкомпечати РФ, свидетельство № 013165 от 23.12.94

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
Н.А. Бушманова — технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Е.А. Типцовой*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 04.05.2011. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 19,0. Уч.-изд. л. 19,0. Тираж 1000. Заказ 108.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России.
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ
в журнале «Научно-технические ведомости СПбГПУ»
серия «Физико-математические науки»

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости СПбГПУ» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Он зарегистрирован в Госкомпечати РФ (свидетельство № 013165 от 23.12.94) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс 71823).

Журнал с 2002 года 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 научным направлениям: **Экономика, Управление в социальных и экономических системах; Информатика; Вычислительная техника; Физика; Математика; Механика; Астрономия; Энергетика; Машиностроение; Транспорт; Строительство; Металлургия и материаловедение; Радиотехника и связь; Электроника; Измерительная техника; Гуманитарные науки; Педагогика; Юридические науки.**

Журнал выпускается в пяти сериях:

1. Физико-математические науки.
2. Экономические науки.
3. Наука и образование.
4. Информатика. Телекоммуникации. Управление.
5. Гуманитарные и общественные науки.

Периодичность выхода серии «Физико-математические науки» — 4 номера в год.

Научные направления серии «Физико-математические науки», учитываемые ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников: **Физика, Математика, Механика, Астрономия.**

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Объем статей, как правило, не должен превышать 20 страниц формата А-4.

2. Количество рисунков и фотографий не должно превышать 6, таблиц — 4, литературных источников — 15.

3. Число авторов статьи, как правило, не должено превышать пяти человек.

4. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы); основная часть (постановка, описание задачи, изложение и суть основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы); список литературы.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word, формул — в редакторе MS Equation. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт — Times New Roman, кегль шрифта основного текста — 14, интервал — 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны 12 кеглем.

Параметры страницы: поля слева 3 см, сверху и снизу 2,5 см, справа 2 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ — 1 см.

6. **Рисунки** (в формате .tif, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов.

7. В формульном редакторе (как и в основном тексте) переменные, обозначенные латинскими символами, набираются курсивом; цифры, греческие и русские символы — прямые.

Химические символы (Ag, Cu) — светлые прямые.

Сокращенные обозначения физических величин и единиц измерения (м, кВт, м/с, W/m) — светлые прямые без точек.

Названия функций (sin, tg, min, const, log, exp и т. д.) — светлые прямые.

В числах десятичным разделителем является запятая.

Размеры шрифтов в формулах:

основной кегль — 11, крупный индекс — 8, мелкий индекс — 6, крупный символ — 14, мелкий символ — 11.

Перенос длинных формул выполняется так, чтобы длина каждой строки не превышала ширину колонки (8 см).

2.2. Представление материалов

Вместе с материалами статьи должны быть обязательно представлены:

- номер УДК в соответствии с классификатором (в заголовке статьи);
- аннотация статьи (2–3 предложения) на русском и английском языках с обязательным переводом на английский язык заголовка статьи и фамилий авторов;
- ключевые слова статьи (5–7) на русском и английском языках;
- сведения об авторах: ФИО, место работы, должность, ученое звание, ученая степень, контактные телефоны, e-mail;
- рекомендация на имя зам. главного редактора журнала, подписанная научным руководителем автора и/или руководителем структурного подразделения. Рекомендация должна быть ОБЯЗАТЕЛЬНО заверена в отделе кадров;
- рецензия на имя зам. главного редактора журнала, подписанная специалистом, имеющим ученую степень доктора наук и/или ученое звание профессора. Рецензия должна быть ОБЯЗАТЕЛЬНО заверена в отделе кадров. Рецензент несет ответственность за содержание статьи, достоверность представленных материалов;
- акт экспертизы о возможности опубликования материалов в открытой печати.

Все материалы должны быть представлены по электронной почте, e-mail: **physics@spbstu.ru.**

2.3. Рассмотрение материалов

Представленные в редакцию материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются на рецензирование. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи, в противном случае она направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения 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.

Публикация материалов аспирантов осуществляется бесплатно.

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 до 18 часов, Наталья Александровна, Виктория Маратовна или по e-mail: **physics@spbstu.ru.**